

TEKNILLINEN KORKEAKOULU

Sähkötekniikan osasto

Anssi Hovinen

HETEROLIITOSTRANSISTORIN VALMISTAMINEN

Diplomityö, joka on jätetty opinnäytteenä tarkastettavaksi
diplomi-insinöörin tutkintoa varten Espoossa 29.10.1992

Työn valvoja


Juha Sinkkonen

18945

TKK SÄHKÖTEKNIIKAN
OSASTON KIRJASTO
OTAKAARI 5 A
02150 ESPOO

Tekijä:	Anssi Hovinen	
Työn nimi:	Heteroliitostransistorin valmistaminen	
päivämäärä:	26. 10. 1992	Sivumäärä: 68
Osasto:	Sähkötekniikan osasto	
Professuuri:	Ele-69	
Työn valvoja:	Juha Sinkkonen	
Työn ohjaaja:	-	
<p>Diplomityössäni käsittelen GaAs/AlGaAs -heteroliitokseen perustuvan kenttävaikutustransistorin valmistusta. Ensiksi tarkastelen galliumarsenidin ja alumiinigalliumarsenidin ominaisuuksia ja käyn läpi heteroliitoksen teoriaa johtamalla liitoksen ominaisuuksia kuvaavat yhtälöt. Sitten laajennan käsittelyn kenttävaikutustransistoriin ja johdan sen virtayhtälön. Prosessointia käsittelevässä osuudessa käyn transistorin valmistusprosessin kehitystyön seikkaperäisesti läpi kiinnittäen huomion erityisesti esiin tulleisiin ongelmiin ja niiden ratkaisuihin. Lopuksi tarkastelen kriittisesti kehitettyä prosessia ja erittelen kohdat, joita edelleen kehittämällä prosessista saadaan käytäntöön paremmin sopiva.</p>		
Avainsanat: GaAs, heteroliitos, MODFET, HEMT		

Author:	Anssi Hovinen	
Name of the thesis:	Fabrication of a heterojunction transistor	
Date:	26. 10. 1992	Number of pages: 68
Faculty:	Faculty of Electrical Engineering	
Professorship:	Ele-69	
Supervisor:	Juha Sinkkonen	
Instructor:	-	
<p>This Master's thesis examines the fabrication of a field effect transistor based on a GaAs/AlGaAs heterostructure. First, I discuss the physical properties of both gallium arsenide and aluminium gallium arsenide, and derive the most important formulas describing the heterojunction characteristics. Then I expand the treatment to the field effect transistor and derive its current-voltage characteristics. In the process-oriented section I explain the evolution of the transistor fabrication process in a step-by-step basis. Special attention is paid to the challenges met with and the operations taken to surmount them. Finally, I critically evaluate the fabrication process and point out the areas in which further development is needed to get a more practical process.</p>		
Keywords: GaAs, heterojunction, MODFET, HEMT		

Alkulause

Teknillisen Korkeakoulun Elektronifysiikan laboratorio tarjoaa Suomen oloissa ainutlaatuiset mahdollisuudet modernin puolijohdetekniikan opiskelulle. Kiinteä yhteiselo samassa rakennuksessa Valtion Teknillisen Tutkimuskeskuksen Otaniemen tutkijoiden kanssa tuottaa kokonaisuuden, jossa vakavan tieteenharjoittamisen ja pirteän teekkarihuumorin yhteen-sulautumisesta syntyy innostunut, eteenpäin suuntautunut ja energinen ilmapiiri. Esitänkin parhaimmat kiitokseni professori Juha Sinkkoselle mahdollisuudesta tehdä diplomityöni juuri tässä laboratoriossa. Laboratorion MBE-ryhmä Veli-Matti Airaksinen ja Risto Salo ansaitsevat kunniamaininnan osoittamastaan kärsivällisyydestä ja nujertumattomuudesta, jolla he konkretisoivat minulle galliumarsenidimaailmaa kaikkine iloineen ja suruineen. DI Esko Sirénin kokemus GaAs-MESFET:n valmistamisesta loi käytännölliset perusteet myös tälle työlle, josta hänelle kiitokset. Yhtäläinen kiitos kuuluu DI Kimmo Taskiselle opastuksesta heteroliitosrakenteiden matematiikassa ja tietokonesimuloinneissa. Käytännön prosessoinneissa korvaamattomana apuna olivat erikoislaboriomiestari Pirjo Tähkääpää ja laboratoriomekaanikko Kristiina Rutanen, joita kiitän erittäin hyvin sujuneesta yhteistyöstä. HALL-mittauksissa minua opasti kiitettävästi Jyrki Kaitila. Tälle diplomityölle ei tarvinnut nimetä erityistä ohjaajaa, sillä sitä oli koko laboratorion henkilökunta.

Espoossa 26. 10. 1992



Anssi Hovinen

Sisällysluettelo:

Tiivistelmä	ii
Abstract	iii
Alkulause	iv
Sisällysluettelo:	v
Lyhenteet ja merkinnät	vi
1 Johdanto	1
2 Heteroliitos	3
2.1 Teoriaa	3
2.1.1 Hilan matemaattinen käsittely	3
2.1.2 Galliumarsenidi	4
2.1.3 Alumiinigalliumarsenidi	5
2.1.4 n+AlGaAs/p-GaAs -heteroliitos	10
2.1.5 Heteroliitoksen matemaattinen käsittely	12
2.2 Heteroliitoksen valmistaminen	16
2.2.1 Vaatimukset	16
2.2.2 Epitaksia ja yksikiteen kasvatus	16
2.2.3 Molekyyliisuihkuepitaksia	17
3 Heteroliitoskenttävaikutustransistori	19
3.1 Hilaohjaus	19
3.2 Tasavirtaominaisuudet	22
3.3 Elektronikaasun kontaktointi	25
3.4 Epäideaalisuuksien vaikutus transistorin toimintaan	29
3.5 Tyhjennysalueaprosksimaation pätevyys	29
4 Heteroliitostransistorin valmistaminen	31
4.1 GaAs -prosessin päävaiheet	31
4.1.1 Pinnan puhdistus	31
4.1.2 Märkäetsaus	33
4.1.3 Valolitografia	35
4.1.4 Lift-off- metallointi MBE:n metallointikammiossa	38
4.1.5 Nitridointi	39
4.1.6 Nitridin syövytys	39
4.2 MODFET-prosessin kehitystyö	39
5 Johtopäätökset	48
6 Yhteenveto	50
7 Lähdeviiteluettelo	51
8 Liitteet	54

Lyhenteet ja merkinnät

α	lineaarisesti alumiiniarsenidin mooliosuudesta riippuvan elektroniaffiniteetin kulmakerroin
β	maksimi transkonduktanssi
γ_0	lineaarisen potentiaalin approksimaatiossa ensimmäisen alivyön energian ja pintakonsentraation välinen verrannollisuuskertoin
γ_1	lineaarisen potentiaalin approksimaatiossa toisen alivyön energian ja pintakonsentraation välinen verrannollisuuskertoin
∂_A	johtavuusvyön pohjan ja fermienergian erotus alumiinigalliumarsenidissa kaukana heteroliitoksesta
Δd	fermienergian linearisoinnin kautta pintakonsentraation yhtälöön tuleva korjaustermi
ΔE_c	johtavuusvyön epäjatkuvuus
ϵ_A	alumiinigalliumarsenidin permittiivisyys
ϵ_G	galliumarsenidin permittiivisyys
ϵ_r	suhteellinen permittiivisyys
μ	liikkuvuus
μ_e	elektronin liikkuvuus
$\rho(x)$	varaustiheys
ρ_{12}	kaksikerrosmallissa kerrosten välissä olevan alueen ylimenoresistanssi
ϕ_B	potentiaalivalli metalli-puolijohde -liitoksen yli
$\phi_i(x)$	alivyön i verhoikäyräfunktio
$\phi_n(r)$	verhoikäyräfunktio
χ	elektroniaffiniteetti
$\Psi(r)$	aaltofunktio
A	pinta-ala
a	lineaarisesti pintatiheydestä riippuvan fermienergian kulmakerroin
AlAs	alumiiniarsenidi
AlGaAs	alumiinigalliumarsenidi
AuGe	kullan ja germaniumin lejeerinki
bcc	body centered cubic, tilakeskinen kuutio

CVD	Chemical Vapour Deposition, kemiallinen kaasukasvatus
D	elektronien tilatiheys alivyöllä
d	maskin paksuus
d_A	hilametalloinnin etäisyys heteroliitoksesta
d_i	seostamattoman alumiinigalliumarsenidin paksuus
d_0	potentiaalin nollakohta alumiinigalliumarsenidissa
DUV	Deep Ultraviolet, valotuksessa käytetty aallonpituusalue
E	energia
E^Γ	Γ -minimin energia
E^X	X-minimin energia
E^L	L-minimin energia
E_d	donoritilan energia johtavuusvyön pohjasta mitattuna
E_{donori}	donoritilan energia valenssivyön maksimista mitattuna
E_F	fermienergia
E_g	kielletyn energiavälin leveys
E_H	vetyatomin perustilan ionisoitumisenergia
E_i	alivyön i energia
E_n	vyön n energia
E_v	valenssivyön maksimin energia
eV	elektronivoltti
F_c	kriittinen sähkökenttä
F_{sA}	sähkökenttä heteroliitoksessa alumiinigalliumarsenidin puolella
F_{sG}	sähkökenttä heteroliitoksessa galliumarsenidin puolella
$F(x)$	sähkökenttä
FATFET	kenttävaikutustransistori, jonka kanavan pinta-ala on suuri johtuen erittäin pitkästä hilasta
fcc	face centered cubic, pintakeskinen kuutio
g	degeneraatio
\hbar	redusoitu Planckin vakio
HEMT	High Electron Mobility Transistor, heteroliitokseen perustuvan

kenttävaikutustransistorin eräs nimitys

HMDS	heksametyylidisilatsaani
I	virta
I	intensiteetti
I_0	valotuksessa valonlähteen intensiteetti
IBM	International Business Machines
I_{DS}	virta nielusta lähteeseen
I_s	kyllästysvirta
InP	indiumfosfidi
InSb	indiumantimoni
K	sovitusparametri resistin paksuuden empiirisessä yhtälössä
k	aaltovektori
k_B	Boltzmannin vakio
KPE	kemiallinen plasmaetsaus
L	kanavan pituus
LASER	Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation
LEC	Liquid Encapsulated Czochralski
LED	Light Emitting Diode
LPE	Liquid Phase Epitaxy, nestefaasin epitaksia
L_{SG}	hilan ja lähteen välinen etäisyys
M	moolimassa
m	massa
m_0	elektronin lepomassa
m^*	efektiivinen massa
MBE	Molecular Beam Epitaxy, molekyyliuiskuepitaksia
MESFET	Metal-Semiconductor Field Effect Transistor
ML	Monolayer, yksi molekyylikerros
MOCVD	Metallo-Organic Chemical Vapour Deposition
MODFET	Modulation Doped Field Effect Transistor, heteroliitokseen perustuvan kenttävaikutustransistorin eräs nimitys

MOS	Metal-Oxide-Semiconductor
n	elektronitiheys
n	diodin ideaalisuuskerroin
N_A	akseptoritiheys
N_{AG}^-	galliumarsenidin ionisoituneiden akseptorien tiheys
N_d	donoritiheys
N_{DG}^+	galliumarsenidin ionisoituneiden donorien tiheys
N_{DA}^+	alumiinigalliumarsenidin ionisoituneiden donorien tiheys
n_s	elektronien pintatiheys
P	resistin kuiva-aineprosentti
p	aukkotiheys
PECVD	Plasma Enhanced Chemical Vapour Deposition, plasma-avusteinen kemiallinen kaasukasvatus
q	alkeisvaraus
R_c	kontaktiresistanssi [Ω mm]
R_{c1}	kaksikerrosmallisissa kontaktiresistanssi kerrokseen 1
R_{c2}	kaksikerrosmallisissa kontaktiresistanssi kerrokseen 2
RIE	Reactive Ion Etching, reaktiivinen ionietsaus
R_{NG}	nielun ja lähteen välinen resistanssi, kun hilaa ei ole
R_{par}	kaksikerrosmallin mukainen parasiittinen lähderesistanssi
R_{SG}	lähteen ja hilan välinen resistanssi
r_{s1}	kaksikerrosmallisissa kerroksen 1 pintaresistanssi
r_{s2}	kaksikerrosmallisissa kerroksen 2 pintaresistanssi
RTA	Rapid Thermal Annealing
S.I.	Semi-Insulating, puolieristävä
SPE	Solid Phase Epitaxy, kiinteän faasin epitaksia
T	absoluuttinen lämpötila
T	resistin paksuus
t	valotusaika

TLM	Transmission Line Measurement, siirtolinjamittaus
$u_{n0}(\mathbf{r})$	vyön n ääriarvokohtaan liittyvän Blochin funktion periodinen osa
$U(\mathbf{r})$	kidepotentiaali
UV	ultraviolettilvalo
V	potentiaali
$V_c(x)$	kanavan potentiaali
V_D	nielun potentiaali
V_{D0}	nielun ulkoinen potentiaali
V_G	hilapotentiaali
$V_{gc}(x)$	hilan ja kanavan välinen potentiaaliero
V_{off}	hilan potentiaali, jolla Shottky-liitoksen alumiinigalliumarsenidin puolelle aiheutetaan pinch-off -potentiaali
V_p	pinch-off -potentiaali
VPE	Vapour Phase Epitaxy, kaasufaasin epitaksia
$V(\mathbf{r})$	häiriöpotentiaali
V_s	lähteen (source) potentiaali
V_{s0}	lähteen ulkoinen potentiaali
v_{sat}	kyllästymisnopeus
V_T	kynnysjännite
W	kierrosnopeus
W_A	tyhjennysalueen leveys alumiinigalliumarsenidissa
W_G	tyhjennysalueen leveys galliumarsenidissa
x	alumiiniarsenidin mooliosuus
y	kanavan mielivaltaisen pieni paksuus
Z	kanavan leveys
Å	Ångström, 10^{-10} m

1 Johdanto

Puolijohdetransistori kehitettiin alunperin puhelintekniikan tarpeisiin. 1940-luvulle tultaessa puhelinkeskusten koko oli paisunut niin suureksi, että elektroniputkien ja sähkömekaanisten releiden luotettavuudesta, tehonkulutuksesta ja koosta tuli ongelma. Joulukuussa 1947 Bellin laboratorioden tutkijat työnsivät kahden kultalangan kärjet germaniumkiteen pintaan hyvin lähelle toisiaan ja havaitsivat rakenteen toimivan vahvistimena. 'Pistekontaktitransistorin' [1] vahvistus ja kaistaleveys olivat pieniä, ominaisuudet vaihtelivat komponentista toiseen ja se kohisi paljon. Tutkimusryhmän johtaja William Shockley totesi ongelmien liittyvän kontaktointiin ja esitti pn-liitokseen perustuvan transistorin toimintaperiaatteen. Bardeen, Brattain ja Shockley saivat transistorin keksimisestä Fysiikan Nobelin palkinnon vuonna 1956.

Vuonna 1951 germaniumtransistoreita valmistettiin jo teollisesti. 1954 Texas Instruments korvasi germaniumin piillä, jolloin transistorin suurin toimintalämpötila kasvoi 75 °C:sta n. 150 °C:een. Puhtaan piin valmistaminen oli halvempaa ja sattumalta pii tarjoaa myös stabiilin, eristävän oksidin (SiO_2), mikä myöhemmin johti MOS-transistorin (Metal-Oxide-Semiconductor) onnistuneeseen valmistukseen Bellin laboratorioissa (1960) ja planaarisiihin integroituihin piireihin.

Samalla kun piihin perustuva tuotanto kehittyi ja paisui, myös muita materiaaleja tutkittiin vaihtelevalla menestyksellä. Galliumarsenidia opittiin valmistamaan Czochralski-menetelmällä vuonna 1962 [2]. Yritykset valmistaa GaAs-bipolaaritransistori 1960-luvun alussa kariutuivat seostamisvaikeuksiin ja GaAs:n huonosta laadusta johtuneeseen vähemmistövarauksenkuljettajien lyhyeen elinaikaan [3]. GaAs:n houkuttelevat ominaisuudet, kuten piitä suurempi kielletyn energiavyön leveys eli suurempi toimintalämpötila-alue, suora vyörakenne optisine ominaisuuksineen (LED, LASER...) ja elektronien suuri liikkuvuus pitivät kuitenkin mielenkiintoa yllä.

1960-luvun lopulla, kun perus-GaAs-prosessointikin oli vielä lapsenkengissään, IBM:n tutkijat L. Esaki ja R. Tsu esittivät ajatuksen galliumarsenidikiteen ja alumiinigalliumarsenidikiteen (AlGaAs) muodostamasta 'heteroliitoksesta' [4]. Liitos mahdollistaa ylimääräisten varauksenkuljettajien tuomisen puolijohdekiteeseen ilman, että varauksenkuljettajien liikkuvuus pienenee epäpuhtaussironnan vuoksi. Vasta molekyyliisuihkuepitaksiamenetelmän (Molecular Beam Epitaxy, MBE) kehittyminen 1970-luvun alkupuoliskolla mahdollisti heteroliitoskomponenttien valmistuksen käytännössä. Ensimmäinen MBE-heteroliitoslaser valmistettiin jo vuonna 1974 [5], mutta heteroliitosrakenteen tuottama suuri elektroniliikkuvuus saatiin mitatuksi vasta vuonna 1978 [6].

Elektroniliikkuvuuden kasvusta seuraa puolijohteen resistiivisyyden pienentyminen, joka johtaa suoraan myös termisen kohinan vähenemiseen. Yhdessä suuren elektroniliikkuvuuden tuottaman signaalin kulkunopeuden kasvun kanssa tämä merkitsee mahdollisuutta valmistaa ylivoimaisia suurtaajuuskomponentteja. Ensimmäinen heteroliitokseen perustuva GaAs/AlGaAs-suurtaajuustransistori onnistuttiin valmistamaan vuonna 1980 [7]. Sen jälkeen

heteroliitoskomponenttien tutkimus on suuntautunut paitsi GaAs/AlGaAs-systeemin ominaisuuksien selvittämiseen ja optimointiin, myös muihin, ominaisuuksiltaan vielä parempiin yhdistepuolijohdemateriaaleihin. Valmistusteknologiaa on järjestelmällisesti kehitetty kohti suurempaa integrointiasetta. Uuden sukupolven nopeiden heteroliitoskomponenttien sovellusalueita ovat supernopeat tietokoneet ja pienikohinaiset esivahvistinasteet satelliittitietoliikenteessä.

Tässä diplomityössä perehdyttiin GaAs/AlGaAs-heteroliitostransistorin valmistukseen suunnittelemalla muutamia komponentteja, kehittämällä pienimuotoinen valmistusprosessi ja tutkimalla prosessilla valmistettujen komponenttien sähköisiä ominaisuuksia. Työselostus jakaantuu neljään osaan. Luvussa 2 tutustutaan GaAs/AlGaAs-heteroliitoksen teoriaan ja liitoksen valmistamiseen. Luvussa 3 teoria laajennetaan heteroliitoskenttävaikutustransistorin käsittelyksi, ja luvussa 4 transistorin valmistaminen käydään seikkaperäisesti läpi. Lopuksi prosessoinnin ja sähköisten mittausten aikana tehtyjen huomioiden perusteella kartoitetaan prosessin pullonkaula-alueet ja vedetään johtopäätökset prosessin edelleenkehittämistä varten.

2. Heteroliitos

Puolijohdekiteen atomit muodostavat periodisen hilan. Hilan voidaan ajatella koostuvan yhdestä rakennuspalikasta ('yksikkökoppi'), jota on kopioitu suuntaisiiroilla siten, että hila täyttää koko kiteen tilavuuden. Useille aineille yksikkökopin geometriaksi voidaan valita kuutio, jossa atomien mahdollisia paikkoja ovat kulmapisteet, sivujen keskipisteet, kuution keskipiste tai kuution lävistäjän jokin piste. Esimerkiksi 'pintakeskisessä kuutiossa' (fcc, face centered cubic) kulmissa ja sivujen keskellä on atomi. Bcc-hilassa (body centered cubic) kulmissa ja kuution keskellä on atomi. Hiili, pii, germanium ja harmaa tina asettuvat 'timanttihilaan', joka koostuu kahdesta sisäkkäisestä pintakeskisestä hilasta, joista toinen on siirtynyt yksikkökuution lävistäjän suunnassa neljäsosan lävistäjän pituudesta [8]. Useat yhdistepuolihteet, kuten galliumarsenidi (GaAs), alumiiniarsenidi (AlAs), indiumfosfidi (InP) ja indiumantimoni (InSb) asettuvat 'sinkkivälkehilaan', joka on timanttihila, jossa pintakeskiset alihilat ovat eri materiaalia.

Yksikkökopin särmien pituuksia kutsutaan kiteen hilavakioiksi. Piin hilavakio on noin 5,43 Å, GaAs:n 5,65 Å ja AlAs:n 5,62 Å. Jos kahden aineen hilageometria ja hilavakiot ovat samoja, niistä voi koostaa yhdistelmähilan, jossa aine muuttuu toiseksi ilman, että kidehila murtuu rajapinnalla. Liitosta kutsutaan heteroliitokseksi. Lievän hilaepäsovituksen tapauksessa hilarakenne jännittyy liitosalueella atomien siirtyessä hieman sivuun tasapainoasemastaan.

Kaksikomponenttisen yhdistepuolihteen hilavakiota voidaan räätälöidä korvaamalla hilan atomeja sopivalla kolmannella komponentilla. Esimerkiksi kun GaAs-hilassa Ga-atomeja korvataan indiumilla, muuttuu hilavakio likimain lineaarisesti InAs-mooliosuuden funktiona GaAs:n 5,65Å:sta InAs:n 6,04Å:iin. Edelleen koska GaAs ja AlAs ovat keskenään lähes hilasovitettuja, myös niiden yhdiste $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ on hilasovitettu GaAs:iin kaikilla mooliosuuksilla x.

2.1 Teoriaa

2.1.1 Hilan matemaattinen käsittely

Bravais-hilalla tarkoitetaan ääretöntä hilapisteiden joukkoa, joka on järjestäytynyt siten, että hila näyttää samanlaiselta tarkasteltiinpa sitä mistä hilapisteestä tahansa [8]. Kolmiulotteinen Bravais-hila voidaan määritellä myös hilapisteen paikkavektorilla

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (1)$$

missä \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 ja \mathbf{a}_3 ovat mielivaltaisia vektoreita, jotka virittävät nollasta poikkeavan tilavuuden, ja n_1 , n_2 ja n_3 ovat kokonaislukuja. Vektoreita kutsutaan hilan kantavektoreiksi.

Hilapisteen ympärillä oleva avaruudenosa, joka on lähempänä ko. hilapistettä kuin mitään toista hilapistettä, muodostaa ns. Wigner-Seitz-kopin.

Reaaliavaruuden hilaa vastaava hila aaltovektoriavaruudessa koostuu niistä aaltovektoreista \mathbf{K} ,

joiden tuottamien tasoaaltojen periodi tai sen monikerta on sama kuin reaaliavaruuden hilalla. K-avaruuden hilaa kutsutaan käänteishilaksi, ja sen Wigner-Seitz-koppia nimitetään I Brillouinin vyöhykkeeksi (IBz). Käänteishilan virittävät kantavektorit \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 ja \mathbf{b}_3 saadaan reaalihilan kantavektoreista muunnoksilla

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} , \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} , \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} .\end{aligned}\tag{2}$$

Blochin teoreeman [8] mukaan Schrödingerin yhtälön

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) ,\tag{3}$$

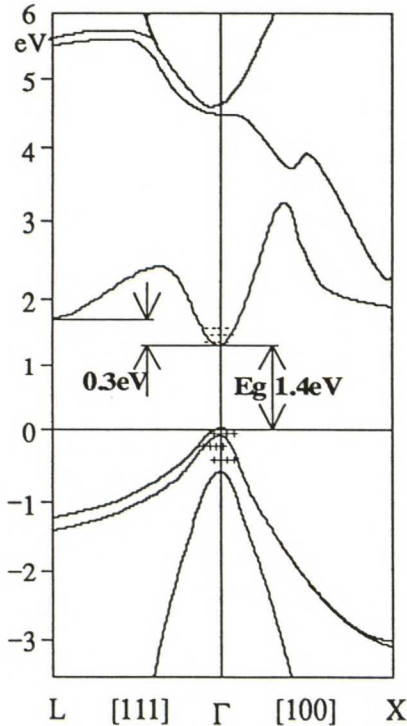
missä potentiaalienergian $V(\mathbf{r})$ periodi on sama kuin reaaliavaruuden hilalla, ratkaisut ovat muotoa

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = U_{\mathbf{n}}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} ,\tag{4}$$

missä $U_{\mathbf{n}}(\mathbf{k}, \mathbf{r})$:llä on hilan periodisuus. Indeksia n kutsutaan vyöindeksiksi. Energialla $E_{\mathbf{k}}$ on käänteishilan periodisuus, joten energiataarkasteluissa riittää käsitellä vain yhtä periodia. Yleensä tällöin viitataan I Brillouinin vyöhykkeeseen.

2.1.2 Galliumarsenidi

Kuvaan 1 on hahmoteltu GaAs:n energiavyödiagrammi huoneenlämpötilassa [9]. Positiivisella energia-akselilla olevat vyöt ovat johtavuusvyöitä (elektronien vyöt), ja negatiivisen puolen vyöt valenssivyöitä (aukkojen vyöt). Johtavuusvyön minimi ja valenssivyön maksimi osuvat päällekkäin Brillouinin vyöhykkeen keskellä Γ -pisteessä. Niiden väliin jää 'kielletty energiaväli' E_g , jonka leveys on noin 1,4 eV. Koska minimi ja maksimi ovat samassa k-avaruuden pisteessä, on vyö 'suora'. Johtavuusvyössä on



Kuva 1: GaAs:n energiavyö-rakenne 300K:ssa

myös sivuminimi L-pisteessä suunnassa [111]. Tämän minimin pohja on vain noin 0,3 eV korkeammalla kuin Γ -minimi.

Varauksenkuljettajien liikkuvuus pienenee efektiivisen massan m^* kasvaessa. Efektiivinen massa puolestaan riippuu vyön kaarevuudesta yhtälön

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \quad (6)$$

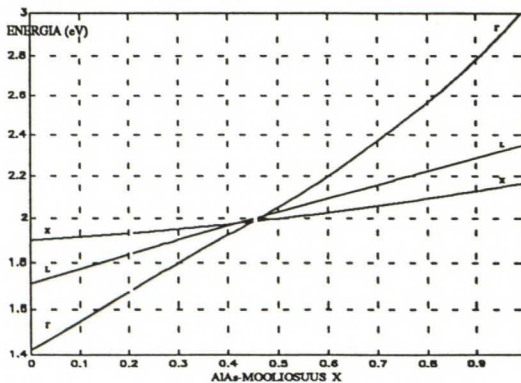
mukaisesti. Kuvasta 1 nähdään, että Γ -minimissä olevan elektronin efektiivinen massa on pienempi kuin L-minimissä. Kun Γ -minimin elektroni saa riittävästi energiaa ja siirtyy L-minimiin, kiteen keskimääräinen elektroniliikkuvuus laskee. Liikkuvuus riippuu myös mm. puolijohteen seostustiheydestä ja lämpötilasta. Seostamattoman GaAs:n elektroniliikkuvuus on huoneenlämpötilassa noin $8500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$.

2.1.3 Alumiinigalliumarsenidi

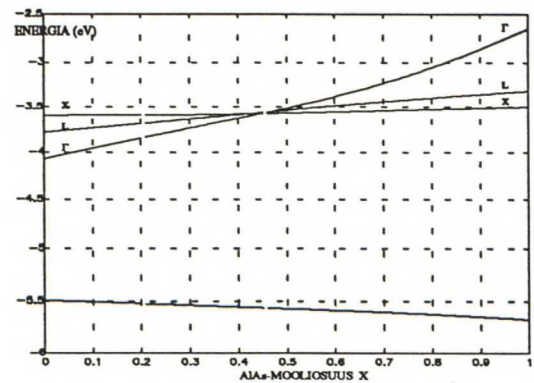
Ga-atomien korvaaminen alumiinilla muuttaa kiteen energiavyörakennetta. Minimien paikat nousevat energia-asteikolla AlAs-mooliosuuden x kasvaessa, jolloin kielletyn energiavälin leveys kasvaa. Γ -minimi nousee nopeimmin ja X-minimi hitaimmin. Minimien paikoille elektronivoltteina (eV) suhteessa valenssivyön maksimiin voidaan esittää likimääräiskaavat [10]

$$\begin{aligned} E_g^\Gamma(x) &= \begin{cases} 1.424 + 1.247x & ; 0.00 \leq x \leq 0.45 \\ 1.424 + 1.247x + 1.147 \cdot (x - 0.45)^2 & ; 0.45 < x \leq 1.00 \end{cases} \\ E_g^X(x) &= 1.900 + 0.125x + 0.143x^2 & ; 0.00 \leq x \leq 1.00 \\ E_g^L(x) &= 1.708 + 0.642x & ; 0.00 \leq x \leq 1.00. \end{aligned} \quad (7)$$

Minimien nousu mooliosuuden funktiona on piirretty kuvaan 2a. Kohdassa $x=0,45$ Γ - ja L-minimit saavuttavat X-minimin. Tämän jälkeen X-minimi on energeettisesti lähimpänä valenssivyön maksimia, ja vyörakenteen voidaan sanoa muuttuneen epäsuoraksi.



Kuva 2a: AlGaAs:n johtavuusvyön minimien siirtyminen AlAs-mooliosuuden x funktiona, kun energian nollatasoksi on valittu valenssivyön maksimi.



Kuva 2b: AlGaAs:n johtavuusvyön minimien siirtyminen AlAs-mooliosuuden x funktiona, kun energian nollatasoksi on valittu tyhjän taso.

Elektroniaffiniteetti

Elektroniaffiniteetti on energia, joka kuluu, kun elektroni nostetaan johtavuusvyöltä kiteen ulkopuolelle tyhjän tasolle. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$:n elektroniaffiniteetille $\chi(x)$ elektronivoltteina (eV) voidaan kirjoittaa [10] yhtälö

$$\chi(x) = \begin{cases} 4.07 - 1.1x & ; 0.00 \leq x \leq 0.45 \\ 3.64 - 0.14x & ; 0.45 < x \leq 1.00. \end{cases} \quad (8)$$

Johtavuusvyön paikan tyhjän tasoon suhteutettu muutos AlAs-mooliosuuden x funktiona on siten

$$\Delta E_c = E_c(x) - E_c(x_0) = \chi(x_0) - \chi(x) . \quad (9)$$

Erityisesti, kun lasketaan muutosta GaAs:iin nähden, eli kun $x_0=0$ saadaan

$$\Delta E_c(x) = \begin{cases} 1.1x & ; 0.00 \leq x \leq 0.45 \\ 0.43 + 0.14x & ; 0.45 < x \leq 1.00. \end{cases} \quad (10)$$

Kun elektroniaffiniteetin käyttäytyminen AlAs-mooliosuuden funktiona on tunnettu, voidaan energian nollassa siirtää valenssivyöltä tyhjän tasolle. Valenssivyön maksimin energia on nyt se työ, joka pitää tehdä, että nousee valenssivyöltä kielletyn energiavälin läpi johtavuusvyölle ja edelleen tyhjän tasolle,

$$E_v(x) = -(E_g(x) + \chi(x)) . \quad (11)$$

Kielletyn energiavälin leveys $E_g(x)$ määräytyi $x=0.45$:een saakka Γ -minimistä ja siitä eteenpäin X -minimistä, joten $E_v(x)$:lle saadaan lausekkeet

$$E_v(x) = \begin{cases} -(5.494 + 0.147x) & ; 0.00 \leq x \leq 0.45 \\ -(5.54 - 0.015x + 0.143x^2) & ; 0.45 < x \leq 1.00. \end{cases} \quad (12)$$

Energiavöiden lausekkeet määräytyvät yhtälöstä

$$E^{\Gamma,X,L} = E_v(x) + E_g^{\Gamma,X,L}(x) , \quad (13)$$

ja saadaan

$$\begin{aligned}
E^r(x) &= \begin{cases} -4.07 + 1.1x & ; \quad 0.00 \leq x \leq 0.45 \\ -3.88 + 0.23x + x^2 & ; \quad 0.45 < x \leq 1.00 \end{cases} \\
E^x(x) &= \begin{cases} -3.594 - 0.022x + 0.143x^2 & ; \quad 0.00 \leq x \leq 0.45 \\ -3.64 + 0.14x & ; \quad 0.45 < x \leq 1.00 \end{cases} \\
E^L(x) &= \begin{cases} -3.786 + 0.495x & ; \quad 0.00 \leq x \leq 0.45 \\ -3.832 + 0.657x - 0.143x^2 & ; \quad 0.45 < x \leq 1.00. \end{cases}
\end{aligned} \tag{14}$$

Energiavyöt on esitetty kuvassa 2b. Valenssivyö on hyvänä approksimaationa lineaarinen x :n funktio koko alueella.

On syytä korostaa, että edellä esitetyt yhtälöt pätevät vain $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ - kiteelle. Heteroliitosten yhteydessä usein nähty Andersonin sääntö [11], joka sitoo johtavuusvyön epäjatkuvuuden ΔE_c ja materiaalien elektroniaffiniteetit χ_1 ja χ_2 ,

$$\Delta E_c = \chi_1 - \chi_2, \tag{15}$$

on osoittautunut käyttökeltvottomaksi, sillä mitatut epäjatkuvuudet ja säännön avulla lasketut arvot eivät useimmiten korreloi [12], [13], [14]. Korvaaviksi malleiksi on esitetty mm. seostamattoman puolijohteen fermitason jatkuvuuteen perustuvaa mallia [15], tai päädytty välillä jopa itse johtavuusvyön jatkuvuuteen [16]. Viime vuosien mittaustulostkertymän perusteella otaksutaan nyt yleisesti, että heteroliitoksen valenssivyön muutos noudattaa suoran vyön tapauksessa kaavaa [17], [18]

$$\begin{aligned}
\Delta E_v &= -(0.33 \dots 0.41) \Delta E_g^r = -(0.33 \dots 0.41) \cdot 1.247x \\
&= -(0.41 \dots 0.51)x.
\end{aligned} \tag{16}$$

Kulmakerroin pysyy likimain vakiona kaikilla x :n arvoilla. Valenssivyön muutosnopeus on siis noin kolme kertaa suurempi kuin kuvassa 2b. Lisäksi GaAs/AlAs-heteroliitoksesta on mitattu johtavuusvyön epäjatkuvuudeksi ΔE_c noin 0,2 eV [18], kun suoraan affiniteeteista laskettu arvo olisi noin 0,57 eV. Välillä $0,45 < x < 1,00$ kielletty energiaväli levenee hitaammin kuin ΔE_v [18], ja koska $\Delta E_v + \Delta E_c = \Delta E_g$, täytyy johtavuusvyön epäjatkuvuuden pienentyä. Näin ei kuitenkaan kuvassa 2b käy.

III-V-yhdistepuolijohteissa elektroniaffiniteetti määräytyy III-ryhmän komponentin elektroniorbitaaleista [10]. Kun III-ryhmän atomin jaksollisen järjestelmän mukainen järjestysluku kasvaa, kasvaa myös affiniteetti. GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -heteroliitoksen ympäristössä efektiivisen affiniteetin määrää Ga-, Al_x - ja Ga_{1-x} -termien resultantti. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$:ta katsoen liitoksen yli näkyvä Ga-termi kasvattaa affiniteettia, ja johtavuusvyön epäjatkuvuus $\Delta E_c'$ jää pienemmäksi kuin Andersonin sääntö olettaisi. GaAs/GaAs-'heteroliitoksessa' affiniteetin muutos on nolla ja GaAs/AlAs-heteroliitoksessa suurin. Ensimmäisenä approksimaationa

voidaan olettaa, että efektiivisen affiniteetin $\chi'(x)$ muutos on lineaarinen AlAs-mooliosuuden x funktio,

$$\chi'(x) = \chi(x) + \alpha x . \quad (17)$$

Koska GaAs/AlAs- heteroliitokselle on mitattu $\Delta E_c = 0,2$ eV, saadaan

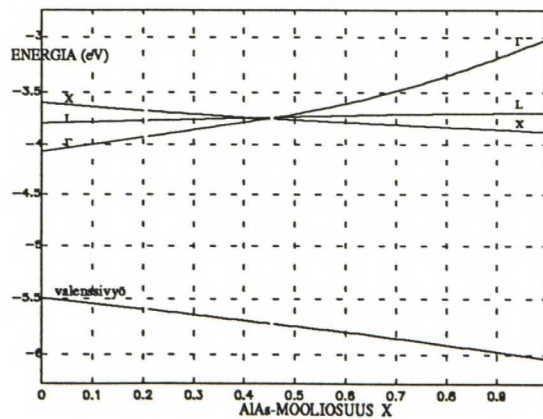
$$\begin{aligned} \chi'(0) - \chi'(1) &= 4.07 - (\chi(1) + \alpha) \\ &= 4.07 - 3.5 - \alpha = 0.2 \\ \Rightarrow \\ \alpha &= 0.37 . \end{aligned} \quad (18)$$

Heteroliitokseen soveltuvaksi affiniteetiksi tulee siten

$$\chi'(x) = \begin{cases} 4.07 - 0.73x ; & 0.00 \leq x \leq 1.00 \\ 3.64 + 0.23x ; & 0.45 < x \leq 1.00. \end{cases} \quad (19)$$

Energiavöiden yhtälöiksi saadaan nyt

$$\begin{aligned} E_v(x) &= \begin{cases} -(5.494 + 0.517x) & ; & 0.00 \leq x \leq 0.45 \\ -(5.54 + 0.355x + 0.143x^2) & ; & 0.45 < x \leq 1.00 \end{cases} \\ E^\Gamma(x) &= \begin{cases} -(4.07 - 0.73x) & ; & 0.00 \leq x \leq 0.45 \\ -(3.88 + 0.14x - x^2) & ; & 0.45 < x \leq 1.00 \end{cases} \\ E^x(x) &= \begin{cases} -(3.594 + 0.392x - 0.143x^2) & ; & 0.00 \leq x \leq 0.45 \\ -(3.64 + 0.23x) & ; & 0.45 < x \leq 1.00 \end{cases} \\ E^L(x) &= \begin{cases} -(3.786 - 0.125x) & ; & 0.00 \leq x \leq 0.45 \\ -(3.832 - 0.287x + 0.143x^2) & ; & 0.45 < x \leq 1.00. \end{cases} \end{aligned} \quad (20)$$



Kuva 3: GaAs/AlGaAs-liitosta koskevan kokeellisen aineiston perusteella johdettu vöiden ääriarvokohtien riippuvuus AlAs-mooliosuudesta x .

Yhtälön (20) mukainen, heteroliitoksen käsittelyyn sopiva vyökuva on esitetty kuvassa 3. Nähdään, että valenssivyö muuttuu lähes lineaarisesti AlAs-mooliosuuden funktiona. Muutosnopeus $\Delta E_v(x) = -0,517x$ lähestyy jo yhtälön (16) mukaisia, yleisesti hyväksyttyjä arvoja. GaAs/Al_xGa_{1-x}As-heteroliitoksen johtavuusvyön epäjatkuvuudella $\Delta E_c(x)$ on maksimi ($=0,329$ eV) kohdassa $x=0,45$. Kohdassa $x=1,00$ $\Delta E_c(x)=0,2$ eV, kuten pitikin. Suoran vyön tapauksessa $\Delta E_c=0,703x$. Tyhjän tasoon suhteutettu energiavöiden käyttäytyminen heteroliitoksen välittömässä läheisyydessä poikkeaa siis huomattavasti Andersonin säännön avulla ennustetusta (kuva 2b), ja osoittaa selvästi, mikä ero on raportoitujen mittaustulosten avulla saatavan vyökuvan ja heteroliitoksen teoriassa yleisesti käytetyn Andersonin mallin mukaisen vyökuvan välillä.

Aktivointienergia

Puolijohteen seostaminen epäpuhtausatomeilla aiheuttaa kiellettyyn energiväliin sallittuja donori- tai akseptoritiloja. Ge, S, Te ja Se toimivat galliumarsenidissa donoriatomeina, ja C, Be, Mg, Zn ja Cd toimivat akseptoreina. Si ja Sn ovat amfoteerisia, eli ne voivat toimia donoreina tai akseptoreina valmistusolosuhteista riippuen.

Alimman johtavuusvyöminimin ja tilan energian eroa kutsutaan tilan aktivointienergiaksi E_d . Aktivointienergia kuvaa seostusatomien ionisoitumisastetta tietyssä lämpötilassa. Karkealla vetyatomimallilla E_d :lle saadaan [9] kaava

$$E_d = \frac{m^* E_H}{m_0 \epsilon_r^2}, \quad (21)$$

missä E_H ($=13.6$ eV) on vetyatomien perustilan ionisoitumisenergia, m_0 elektronin lepomassa ja ϵ_r puolijohteen suhteellinen permittiivisyys. Puolijohteissa, joissa johtavuusvyökuva koostuu useista minimeistä, vetymalli antaa liian pieniä aktivointienergioita. Tarkempaan tulokseen päästään ns. moniminimimallilla (multivalley effective-mass model [19]), jonka on osoitettu toimivan hyvin piiseostetulla Al_xGa_{1-x}As:lla.

Aktivointienergioita voidaan tutkia esimerkiksi mittaamalla puolijohteen HALL-elektronikonsentraatiota lämpötilan funktiona. Lämpötilan laskiessa syvällä kielletyssä energiavyössä olevat tilat miehittyvät ensin. Kun elektronikonsentraatio piirretään absoluuttisen lämpötilan käänteisluvun funktiona puolilogaritmiasteikolle, saadaan suora, jonka kulmakerroin kuvaa puolijohteen dominoivan donoritilan aktivointienergiaa. Ionisoituneiden donorien tiheys saadaan tarvittaessa varausneutraliteettiehdosta [19]

$$\frac{n(N_A + n)}{N_D - N_A - n} = \frac{N_C}{g} e^{\left(\frac{E_d}{k_B T}\right)} \quad (22)$$

missä n on puolijohteen elektronikonsentraatio, N_A akseptoritiheys, N_D donoritiheys, N_C johtavuusvyön tilatiheys ja g ($=2$) donoritilan spin-degeneraatio.

Viitteessä [19] on tutkittu piiseostetun $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$:n aktivointienergian käyttäytymistä AlAs -mooliosuuden funktiona, ja mallinnettu sitä vyöminimeihin assosioitujen donoritilojen avulla. Γ -minimiin esitetään liittyvän energieettisesti 'matala' donoritila, ja L- ja X-minimeihin paljon 'syvemmät' donoritilat. AlAs -mooliosuuden x muuttuessa minimien ja niihin liittyvien donoritilojen paikat siirtyvät energia-asteikolla kuvan 2a mukaisesti. Aktivointienergiaa dominoi se donoritila, joka jää energieettisesti syvimmälle kiellettyyn energiaväliin. Mallin avulla saatu dominoivan donoritilan aktivointienergia $E_d(x)$ on likimain vakio välillä $0,00 < x < 0,22$. Tällä välillä johtavuusvyön minimi määräytyy Γ -minimistä, ja L- ja X-minimien donoritilat jäävät Γ -minimin yläpuolelle johtavuusvyöhön. Dominoiva donoritila liittyy siten Γ -minimiin. Välillä $0,22 < x < 0,40$ aktivointienergia kasvaa likimain lineaarisesti yhtälön [19]

$$E_d(x) \cong 0.707x - 0.146 \text{ eV} \quad ; \quad 0.22 < x < 0.40 \quad (23)$$

mukaisesti. Tällä alueella AlGaAs :ssa on kaksi donoritilaa, Γ -minimin matala ja L-minimin syvä donoritila, joka on nyt tunkeutunut kiellettyyn energiaväliin. Suuremmilla x :n arvoilla aktivointienergia pienenee X-minimin vaikutuksen vuoksi.

Valenssivyön maksimiin suhteutettu dominoivan donoritilan energia $E_{\text{donori}}(x)$ on lineaarinen x :n funktio välillä $0,22 < x < 1,00$ [19]. Kiellettyjen energiavälien yhtälöiden ja $E_d(x)$:n avulla saadaan

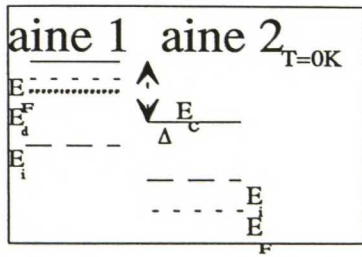
$$E_{\text{donori}}(x) = E_g^{\Gamma}(x) - E_d(x) = 1.57 + 0.54x \quad ; \quad 0.22 < x < 0.40 \quad (24)$$

Edelleen, koska $E_{\text{donori}}(x)$ on lineaarinen myös välillä $0,45 < x < 1,00$, saadaan

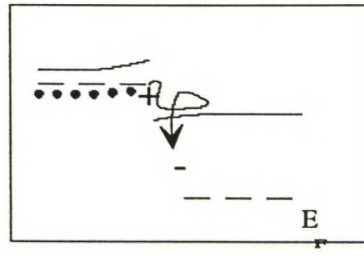
$$\begin{aligned} E_g^X(x) - E_d(x) &= 1.57 + 0.54x \\ \Leftrightarrow \\ E_d(x) &= 0.33 - 0.415x - 0.143x^2 \quad ; \quad 0.45 < x < 1.00 \end{aligned} \quad (25)$$

2.1.4 $n^+\text{AlGaAs}/p^-\text{GaAs}$ -heteroliitos

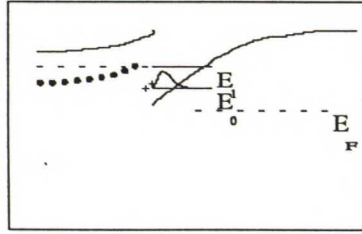
Kuvassa 4a on esitetty erillisten AlGaAs - ja GaAs -kiteiden yksiulotteinen energiatasokaavio. Abskissa-akselina on nyt reaaliavaruudessa mitattu etäisyys rajapinnasta. Molemmat kiteet ovat termisessä tasapainossa, joten fermienergia on vakio kiteiden yli, joskin energieettisesti eri korkeuksilla. Lämpötilaksi on selvyiden vuoksi valittu 0K . AlGaAs on voimakkaasti donoriseostettu (n^+) ja GaAs heikosti akseptoriseostettu (p^-). Absoluutisessa nollassa AlGaAs :n elektronit ovat donoritiloilla ja fermitaso johtavuusvyön ja 'donorivyön' välissä. GaAs :ssa fermitaso on seostamaton puolijohdetta vastaavan fermienergian E_i alapuolella, akseptoritilojen ja valenssivyön välissä.



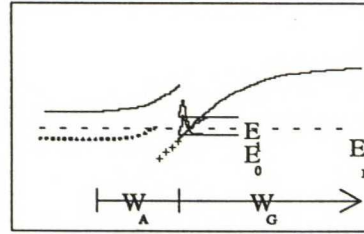
Kuva 4a



Kuva 4b



Kuva 4c



Kuva 4d

Kuva 4: Heteroliitoksen termisen tasapainon muodostuminen

GaAs:iin. Kuvassa 4b on esitetty karrikoidusti tilanne ensimmäisen elektronin tunneloitumisen jälkeen. Elektroni on jättänyt AlGaAs:iin ionisoituneen donoritilan. GaAs:n puolella elektroni rekombinoituu aukon kanssa. Muodostunut heikko donori-akseptori-dipoli aiheuttaa sähkökentän, joka taivuttaa johtavuusvyötä. Keskimääräisten energioiden ero on pienentynyt. AlGaAs:ssa vyön taipuma pienentää tunneloitumistodennäköisyyksiä, ja GaAs:n puolella taipumasta aiheutuu energiaminimin keskittyminen rajapinnalle. Johtavuusvyöiden epäjatkuvuus ei tässä kokeessa muutu. Tunneloitumisprosessin edetessä sähködipoli vahvistuu ja vyöt taipuvat yhä enemmän. Jossakin vaiheessa rajapintaan on kertynyt enemmän elektroneja kuin siinä oli akseptoreja ($n > N_A$), jolloin rajapintaan muodostuu inversiokerros MOS-transistorin tapaan. Johtavuusvyössä elektronit hakeutuvat liitoksen energiaminimiin. Tästä eteenpäin dipolin vahvistuminen aiheutuu pääasiassa donori-elektroni-pareista. Tyhjennysalue GaAs:ssa 'jäättyy'.

Kuvan 4c tilanteessa GaAs:n johtavuusvyön taipumisesta aiheutuvan potentiaaliukuopan leveys on jo kutistunut alle termisen elektronin de Broglie -aallonpituuden (noin 100\AA), joten kuopan sallitut energiatilat ovat muuttuneet diskreeteiksi alivöiksi (E_i). Elektronien tunneloituminen liitoksen läpi lakkaa vasta, kun systeemin kokonaisenergia on minimoitunut. Tällöin dipoliin varastoitunut energia kompensoi fermienergioiden erotuksen. Tasapainotilanne on esitetty kuvassa 4d. Liitoksen GaAs:n puolelle on johtavuusvyöhön muodostunut kohtisuoraan liitosta vastaan kvantisoitunut elektronisysteemi. Systeemin vapausasteita ei ole rajoitettu liitoksen tasossa, joten voidaan puhua kaksidimensioisesta elektronikaasusta (2deg). AlGaAs:n puolella ionisoituneet donorit muodostavat positiivisen avaruusvarausalueen syvyydelle W_A saakka (tyhjennysalueapproksimaatio). GaAs:n puolella ionisoituneet akseptorit aiheuttavat tyhjennysalueen W_G . Koska GaAs oli heikosti seostettu on $W_G \gg W_A$.

Liitoksen suuntaisen sähkökuljetuksen kannalta heteroliitoksen lähes virheetön seinämä tuottaa paljon pienemmän pintasiron tatermin kuin esimerkiksi MOS-transistorin oksidi/kanava-

Yhtenäisen

AlGaAs/GaAs-liitoksen

energiatasokaavio

voidaan hahmotella

seuraavan ajatuskokeen

avulla:

Kun kuvan 4a kiteet

yhdistetään, AlGaAs:n

donoritilojen elektronit

näkevät GaAs:n

johtavuusvyön uutena

energiaminiminä, ja

elektroneja alkaa

tunneloitua AlGaAs:sta

rajapinta. Elektronien siirtymisestä vahvasti seostetusta AlGaAs:sta lähes seostamattomaan GaAs:iin seuraa lisäksi, että elektronien kokema Coulombin sironta ionisoituneista epäpuhtausatomeista vähenee merkittävästi. Elektronin liikkuvuus μ_e , joka on elektronin nopeuden ja siihen vaikuttavan pienen sähkökentän välinen verrannollisuuskertoimen, vastaa lähes seostamattoman GaAs:n liikkuvuutta samalla kun elektronitiheys vastaa vahvasti seostettua GaAs:a. Liikkuvuuden kasvu tulee korostetusti esiin matalissa lämpötiloissa, joissa Coulombin sironta on merkittävin liikkuvuutta rajoittava tekijä. Sirontaa voidaan pienentää edelleen lisäämällä GaAs:n ja n^+ AlGaAs:n väliin ohut, seostamaton AlGaAs-kerros, jolloin elektronien ja donoriatomien välimatka kasvaa.

2.1.5 Heteroliitoksen matemaattinen käsittely

Kun heteroliitoksessa liikkuvaan elektroniin vaikuttava potentiaali kirjoitetaan kidepotentiaalin $U(\mathbf{r})$ ja häiriöpotentiaalin $V(\mathbf{r})$ summana, elektronin Schrödingerin yhtälöksi saadaan

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}), \quad (26)$$

missä m on elektronin massa, E elektronin kokonaisenergia. $U(\mathbf{r})$ on tuntematon, mutta siitä voidaan päästä eroon n.s. 'verhokäyräapproksimaatiolla' [21]. Approksimaatiossa elektronisysteemiä kuvataan kokonaisaaltofunktiolla

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n \phi_n(\mathbf{r}) u_{n0}(\mathbf{r}), \quad (27)$$

missä $u_{n0}(\mathbf{r})$ on vyön n ääriarvokohtaan liittyvän Blochin funktion periodinen osa. $\phi_n(\mathbf{r})$ on n.s. 'verhokäyräfunktio', koska se amplitudimoduloi nopeasti vaihtelevaa $u_{n0}(\mathbf{r})$:ää. Schrödingerin yhtälö saadaan yhtälön (27) avulla [21] muotoon

$$-\frac{\hbar^2}{2m_n^*} \nabla^2 \phi_n(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r}) = E_n \phi_n(\mathbf{r}), \quad (28)$$

missä kidepotentiaalin $U(\mathbf{r})$ vaikutus on saatu piilotettua efektiiviseen massaan m_n^* . E_n on nyt elektronin energia vyön n pohjasta mitattuna. Kun vyöt ovat kaukana toisistaan ja tarkastellaan vain yhden ääriarvokohdan läheisyydessä olevia tiloja, voidaan muiden vyöiden vaikutus unohtaa, ja päästään 'yhden vyön malliin'. Kun $V(\mathbf{r})$ vaihtelee vain liitosta vastaan kohtisuorassa suunnassa, yhtälö separoituu liitoksen suuntaiseen ja sitä vastaan kohtisuoraan komponenttiin. Kohtisuoraksi osaksi saadaan

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_i(x) + V(x) \phi_i(x) = E_i \phi_i(x), \quad (29)$$

missä $\phi_i(x)$ on 'alivyön' i verhokäyräfunktio ja E_i alivyön i pitkittäinen energia.

Elektronien tilatiheys alivyöllä, eli tilojen lukumäärä pinta-alayksikköä ja energiayksikköä

kohti, on

$$D = \frac{m^*}{\pi \hbar^2}, \quad (30)$$

kun spindegeneraatio on 2. Alivyön i elektronien pintatiheys $n_{s,i}$ on siten

$$n_{s,i} = D \int_{E_i}^{\infty} \frac{dE}{1 + e^{\frac{E-E_F}{k_B T}}}, \quad (31)$$

ja koska

$$\int \frac{dx}{1 + e^x} = -\ln(1 + e^{-x}),$$

saadaan

$$n_{s,i} = D k_B T \ln\left(1 + e^{\frac{E_F - E_i}{k_B T}}\right). \quad (32)$$

Tavallisesti vähintään 80% elektroneista on kahdella alimmalla vyöllä [22], ja ottamalla vain nämä huomioon saadaan heteroliitoksen elektronien pintatiheydeksi

$$n_s = \sum_0^1 n_{s,i} = D k_B T \left[\ln\left(1 + e^{\frac{E_F - E_0}{k_B T}}\right) + \ln\left(1 + e^{\frac{E_F - E_1}{k_B T}}\right) \right]. \quad (33)$$

Lineaarisen potentiaalin approksimaatio

Potentiaali $V(x)$ heteroliitoksen GaAs:n puolella määräytyy Poissonin yhtälöstä

$$\frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon_G}, \quad (34)$$

missä ϵ_G on GaAs:n permittiivisyys ja $\rho(x)$ varaustiheys GaAs:ssa. Varaustiheys saadaan yhtälöstä

$$\rho(x) = q \left[N_{DG}^+ - N_{AG}^- - \sum_{i=0}^{\infty} n_{s,i} \phi_i^2(x) \right], \quad (35)$$

missä q on alkeisvaraus ja N_{DG}^+ (N_{AG}^-) GaAs:n ionisoituneiden donorien (akseptorien) tiheys. Summatermi edustaa elektronikaasun varausta.

Yhtälöiden (29) ja (34) yhteisen tarkan ratkaisun hakeminen onnistuu vain numeerisesti. Potentiaalikuopan GaAs:n puoleinen seinämä on kuitenkin melko lineaarinen liitoksen läheisyydessä (kuva 5), joten kuoppaa voidaan approksimoida lineaarisella potentiaalilla,

$$V(x) = F_{sG} x, \quad (36)$$

missä $F_{sG} = F(x=0)$ on sähkökenttä heteroliitoksessa GaAs:n puolella. Potentiaalin nollakohdaksi on otettu kuopan pohja. Liitoksen pinnassa vaikuttava kenttä saadaan integroimalla Poissonin yhtälöstä

$$\epsilon_G \frac{dF(x)}{dx} = \rho(x) = -q(N_{AG}^- + n(x)) , \quad (37)$$

missä N_{AG}^- on ionisoituneiden akseptorien tiheys GaAs:n tyhjennysalueella ja $n(x)$ elektronitiheys. Tyhjennysalueen reunalla ($x=W_G$) sähkökenttä on nolla, joten integroimalla liitoksesta GaAs:n tyhjennysalueen W_G yli saadaan

$$\epsilon_G [F(W_G) - F(0)] = -\epsilon_G F_{sG} = -q(N_{AG}^- W_G + n_s) \approx -qn_s , \quad (38)$$

kun ionisoituneista akseptoreista aiheutuva termi voidaan olettaa pieneksi.

Lineaarisen potentiaaliukuopan tapauksessa alivyyön Schrödingerin yhtälön verhoikäyräfunktioiksi ϕ_i saadaan Airy-funktioita. Ominaisarvot E_i määräytyvät likimääräisyhtälöstä [23]

$$E_i \approx \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^{\frac{1}{3}} \left[\frac{3}{2} q\pi F_{sG} \left(i + \frac{3}{4} \right) \right]^{\frac{2}{3}} = \gamma_i n_s^{\frac{2}{3}} . \quad (39)$$

Annettu pintakonsentraatio n_s määrää siis alivöiden energiat E_i . Sijoittamalla lukuarvot ($m^*=0.067m_e$, $\epsilon_G=13.18\epsilon_0$ [10]) saadaan numeerisille kertoimille γ_i

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= 2.4 \cdot 10^{-12} \text{ eVm}^{4/3} \\ \gamma_1 &= 4.2 \cdot 10^{-12} \text{ eVm}^{4/3} . \end{aligned} \quad (40)$$

Vaikka potentiaali ei todellisuudessa olekaan lineaarinen, on approksimaatio melko hyvä, sillä kokeellisesti saadut kertoimet ovat [24]

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= 2.5 \cdot 10^{-12} \text{ eVm}^{4/3} \\ \gamma_1 &= 3.2 \cdot 10^{-12} \text{ eVm}^{4/3} . \end{aligned} \quad (41)$$

Kun GaAs:n akseptoriseostus on pieni, lähes kaikki AlGaAs:sta peräisin olevat elektronit löytyvät potentiaaliukuopasta. Pintatiheyden yläraja saadaan tyhjennysalueapproksimaatiolla,

$$N_{DA}^+ (W_A - d_i) = n_s , \quad (42)$$

missä W_A on varausneutraalin AlGaAs:n reunan etäisyys heteroliitoksesta. Merkitään seuraavassa sähkökenttää AlGaAs:ssa $F_A(x)$:llä. Sähkökenttä liitoksessa $F_A(0)=F_{sA}$ saadaan Poissonin yhtälöstä integroimalla, jolloin

$$\epsilon_A F_{sA} = -q \int_{-d_i}^{-W_A} N_{DA}^+ (x) dx = qN_{DA}^+ (W_A - d_i) . \quad (43)$$

Kenttä pysyy vakiona seostamattoman kerroksen yli. Sen jälkeen

$$F_A(x) = F_{sA} + \frac{qN_{DA}^+}{\epsilon_A} \int_{-d_i}^x dx = F_{sA} + \frac{qN_{DA}^+}{\epsilon_A} (x + d_i) ; \quad -W_A \leq x \leq -d_i . \quad (44)$$

Potentiaali saadaan kentän negatiivisena integraalina. Tyhjennysalueen reunan potentiaaliksi tulee siten

$$V(-W_A) = \frac{qN_{DA}^+}{2\epsilon_A} (W_A^2 - d_i^2) . \quad (45)$$

Tästä voidaan W_A ratkaista. Kuvan 5 perusteella $V(-W_A)$ on toisaalta

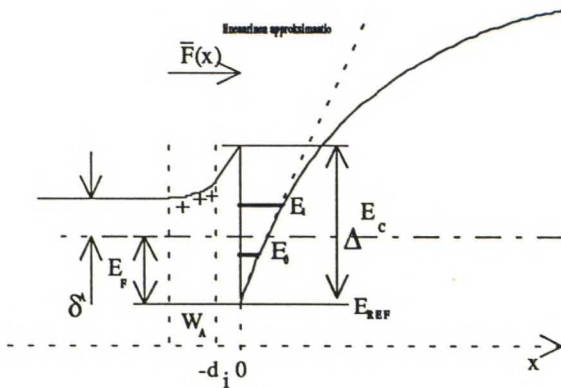
$$V(-W_A) = \frac{\Delta E_c - \delta_A - E_F}{q} . \quad (46)$$

Sähkövuon tiheyden jatkuvuudesta seuraa ehto

$$\epsilon_G F_{sG} = \epsilon_A F_{sA} = qn_s . \quad (47)$$

Ratkaisemalla W_A (45):sta, sijoittamalla (43):een ja vaatimalla, että (33) ja (47) toteutuvat samanaikaisesti saadaan ehto

$$\sqrt{2q\epsilon_A N_{DA}^+ V(-W_A) + q^2 d_i^2 N_{DA}^{+2}} - qN_{DA}^+ d_i = Dk_B T \left[\ln\left(1 + e^{\frac{E_F - E_0}{k_B T}}\right) + \ln\left(1 + e^{\frac{E_F - E_1}{k_B T}}\right) \right] = qn_s . \quad (48)$$



Kuva 5: Laskuissa käytetyt muuttujat

Annettu pintakonsentraatio n_s määrää energiat E_0 ja E_1 yhtälön (40) kautta. Vastaava fermienergia saadaan iteroimalla. Kun E_F :n yritettä kasvatetaan, yhtälön (49) vasen puoli pienenee ja oikea puoli kasvaa. Sopivalla E_F :n valinnalla yhtälö tasapainottuu.

Kun iteroitu fermienergia piirretään n_s :n funktiona, voidaan onnekkaisesti todeta, että E_F riippuu likimain lineaarisesti n_s :sta kun $n_s > 5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Voidaan kirjoittaa [20]

$$E_F \approx \Delta E_F(T) + qan_s ; \quad n_s > 5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2} , \quad (49)$$

missä

$$\begin{aligned}\Delta E_F(300\text{K}) &= 0 \\ \Delta E_F(77\text{K}) &= 0.025 \text{ eV} \\ a &= 1.25 \cdot 10^{-16} \text{ Vm}^2 .\end{aligned}$$

Yhtälö (47) saadaan nyt muotoon

$$V(-W_A) = \Delta E_c - \delta_A - \Delta E_F(T) - qan_s . \quad (50)$$

Sijoittamalla tämä yhtälöön (48) saadaan n_s :lle toisen asteen yhtälö, jonka ratkaisu on

$$n_s = \sqrt{\frac{2\epsilon_A N_{DA}^+}{q^2} [\Delta E_c - \delta_A - \Delta E_F(T)] + N_{DA}^+ (d_i + \Delta d)^2 - N_{DA}^+ (d_i + \Delta d)} , \quad (51)$$

missä merkittiin

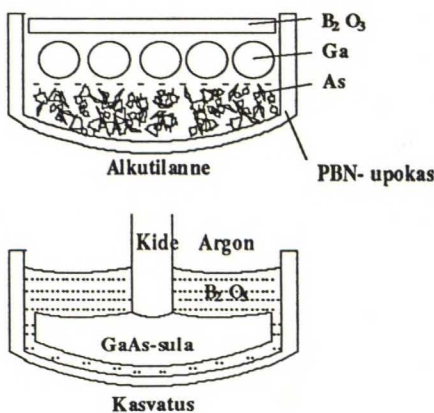
$$\Delta d = \frac{\epsilon_A a}{q} . \quad (52)$$

2.2 Heteroliitoksen valmistaminen

2.2.1 Vaatimukset

Kidemateriaalin on muututtava heteroliitoksessa jyrkästi toiseksi ilman, että hilarakenne murtuu, joten materiaalien koostumus on hallittava hilavälin tarkkuudella. Atomien diffuusiota liitoksen yli ei saa tapahtua; diffuusiovakioiden on oltava pieniä, eikä korkeita lämpötiloja sallita. Huoneenlämpötilassa tapahtuva diffuusio rajoittaisi liitoksen pitkän aikavälin luotettavuutta. Koska heteroliitos muodostuu tasoon, on parametrien vaihtelu liitostason yli pystyttävä pitämään kurissa.

2.2.2 Epitaksia ja yksikiteen kasvatus



Kuva 6: LEC-laitteisto

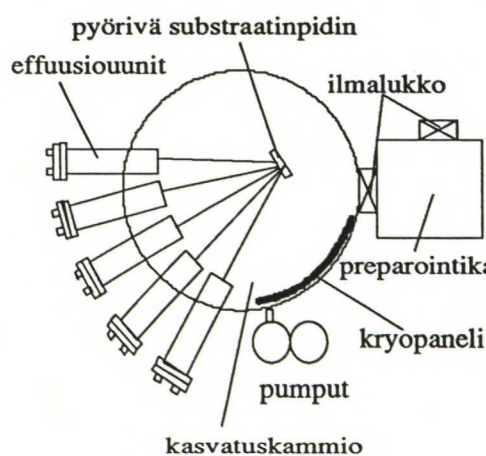
Epitaksia (kreik.: *epi*'= päällä, lisäksi; *taxis*=järjestys) tarkoittaa kiteen kasvatusta siemenkiteen päälle siten, että siemenkiteen hilarakenne jatkuu kasvavassa kiteessä. Kasvatusmenetelmät jaetaan kiinteän faasin (Solid Phase Epitaxy, SPE), nestefaasin (Liquid Phase Epitaxy, LPE) ja kaasufaasin (Vapour Phase Epitaxy, VPE) epitaksioihin sen mukaan missä faasissa kasvatettava materiaali tuodaan siemenkiteen pinnalle. Edellä esitettyjen vaatimusten vuoksi heteroliitoksen epitaksinen valmistus onnistuu vain matalan lämpötilan VPE-

tyyppisillä menetelmillä.

Kemiallinen kaasukasvatus (Chemical Vapour Deposition, CVD) perustuu kaasumaisten lähtöaineiden reagoimiseen siemenkiteen läheisyydessä ja reaktiotuotteena syntyvän materiaalin asettumiseen epitaksisesti siemenkiteen pintaan. Galliumarsenidin kasvatukseen soveltuu n.s. MOCVD (Metallo-Organic-), missä lähtöaineina käytetään metallin ja orgaanisen aineen kaasumaisia yhdisteitä. Reaktion tapahtuminen vaatii tyypillisesti niin korkean lämpötilan, ettei perus-MOCVD sovellu heteroliitoksen valmistukseen.

Galliumarsenidin perusongelma on galliumin ja arseenin suuri höyrynpaine-ero. GaAs-kidettä lämmitettäessä arseeni höyrystyy nopeammin, jolloin kiteen pintaan jää galliumpitoinen kerros. Korkeissa lämpötiloissa on huolehdittava riittävästä As-ylipaineesta taustakaasussa hajaantumisen estämiseksi. Tämä asettaa erityisvaatimuksia yksikiteen kasvatukselle. GaAs:ia voidaan kasvattaa kuvan 6 mukaisella LEC- laitteistolla (Liquid-Encapsulated Czochralski) [2]. Piin valmistuksesta tuttuun Czochralski-laitteistoon on lisätty dibooritrioksidivaippa (B_2O_3), joka estää arseenin höyrystymisen. Tulppavaikutusta tehostetaan paineisella jalokaasulla (Argon). Kasvatuksen alkutilanne on esitetty kuvassa 6a. Aluksi paine on n. 40 atm. Kun lämpötilaa nostetaan, Ga sulaa ja peittää As:n. Lämpötilassa 450-500 °C myös B_2O_3 sulaa ja kapseloi Ga-As-seoksen. Tässä vaiheessa paine nostetaan n. 70 atm:een. Arseni sulaa n. 800°C:ssa, ja GaAs-kiteen kasvu voi alkaa. Kasvukeskuksena on boorioksidin läpi työnnetty GaAs-kide, jota vedetään hitaasti ylöspäin samalla pyörittäen. Boorioksidista jää suojaava kalvo jäähtyvän kiteen päälle. Kasvatettava kide saastuu boorilla $10^{14}..10^{17} \text{ cm}^{-3}$ saakka [2].

2.2.3 Molekyylisuihkuepitaksia



Kuva 7: MBE:n pääosat

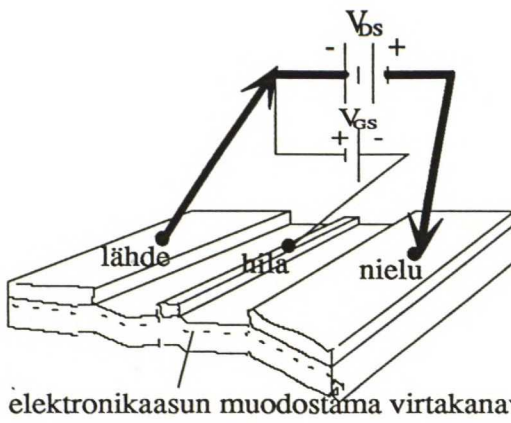
Molekyylisuihkuepitaksia (Molecular Beam Epitaxy, MBE) perustuu materiaalin höyrystämiseen suurtyhjiolosuhteissa. Kun tyhjäkammion taustapaine on riittävän pieni, höyrystyvän molekyylin keskimääräinen vapaa matka on suurempi kuin kammion pituus. Koska törmäyksiä taustakaasun molekyylin kanssa ei tapahdu, höyrystimestä lähtevä materiaalisuihku pysyy hyvin koossa. Molekyyli takertuu ensimmäiseen kohtaamaansa viileään pintaan. Jos pinta on yksikidettä ja olosuhteet sopivat, saadaan aikaan epitaksinen kasvu.

Molekyylisuihkuepitaksialaitteiston pääpiirteet on esitelty kuvassa 7. Kammion paine kasvatuksen aikana on 10^{-10} Torr luokkaa. Höyrystettävät materiaalit on sijoitettu effuusiouuneihin, jotka on eristetty toisistaan siten, että uunien yksilöllinen lämpötilansäätö on mahdollista. Lämpötilalla säädetään lähtevän suihkun intensiteettiä. Uunien pitkulainen muoto

tuottaa melko kohdistetun molekyylisuihkun. Suihkut on kohdistettu siten, että ne risteävät substraatinpitimen kohdalla. Koska ensimmäinen viileä pinta pysäyttää molekyylin, suihkun pääsy substraatille on helppo estää uunin eteen asetetulla mekaanisella sulkimella. Galliumarsenidia kasvatettaessa käytetään hyväksi arseenin heikkoa tarttuvuutta arseeniin. Käytännössä kaikki pintaan osuvat galliumatomit tarttuvat kiinni, mutta arseenista vain yksi atomi jokaista galliumatomia kohti. Stökiometrinen kasvu onnistuu, jos arseenivuo pintaa kohti on suurempi kuin galliumvuo. Ehto on helppo täyttää asettamalla uunien lämpötilat sopiviksi. Tarttuvuudet riippuvat myös substraatin lämpötilasta. GaAs:a kasvatettaessa substraatin lämpötila pidetään n. 590 °C:ssa. Epitaksisen kerroksen kasvunopeus on vain muutamia Ångströmejä sekunnissa, ja koska mekaanisen sulkimen vasteaika on sekunnin murto-osa, voidaan kerroksen kasvua kontrolloida periaatteessa atomaarisella tarkkuudella. Tämä yhdessä substraatin suhteellisen matalan lämpötilan kanssa mahdollistaa myös heteroliitosrakenteiden valmistamisen molekyylisuihkuepitaksialla.

MBE voidaan toteuttaa myös siten, että lähtöaineet ovat MOCVD:n tapaan kaasumaisia. MOMBE:ssa (Metallo-Organic Molecular Beam Epitaxy) effuusiouunit on korvattu kaasumaisten lähtöaineiden krakkaimilla. MOMBE:n etu tavalliseen kiinteän lähteen MBE:hen verrattuna on suihkujen tasaisempi laatu.

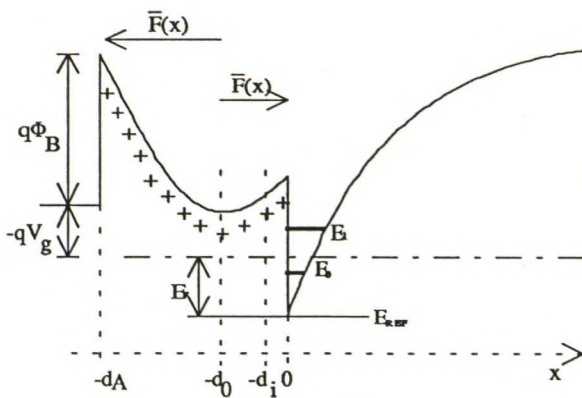
3. Heteroliitoskenttävaikutustransistori



Kuva 8: Heteroliitos- FET

AlGaAs:n paksuudella pintatiheys menee nollassa. Koska metalliin tuotu potentiaali muuttaa Schottky-liitoksen tyhjennysalueen leveyttä, on potentiaalilla suora vaikutus pintatiheyteen. Periaatetta käytetään hyväksi heteroliitoskenttävaikutustransistorissa, kuva 8. Elektronikaasu on kontaktoitu Schottky-liitoksen (hilan) molemmilta puolilta. Kontaktit on nimetty MESFET:n tapaan lähteeksi (source, S) ja nieluksi (drain, D). Elektronikaasu on rajattu siten, että ainoa virtatie lähteestä nieluun kulkee hila alta. Virran suuruus tietyllä nielun ja lähteen välisellä potentiaalierolla riippuu elektronikaasun pintatiheydestä, joka puolestaan riippuu hila potentiaalista.

3.1 Hilaohjaus



Kuva 9: Laskuissa käytetyt muuttujat

Schottky-diodilla varustettu heteroliitos on esitetty kuvassa 9. Energian referenssitaso on potentiaalikuopan pohjalla. Metallipolijohdeliitos on kohdassa $x = -d_A$. Välillä $[-d_A, -d_1]$ oleva AlGaAs-kerros on donoriseostettu, seostustiheys N_{dA} . Välillä $[-d_1, 0]$ on seostamaton AlGaAs:a, ja väliltä $[-d_0, -d_1]$ AlGaAs on tyhjentyne heteroliitokseen. Sähkökenttä on tällä alueella heteroliitokseen päin. Loput AlGaAs:sta on tyhjentyne metalliin ja kenttä on metalliin päin.

Sähkökenttä $F(x)$ AlGaAs:ssa ratkeaa Poissonin yhtälöstä

$$\epsilon_A \frac{dF(x)}{dx} = \rho(x) ,$$

missä ϵ_A on AlGaAs:n permittiivisyys ja $\rho(x)$ varaustiheys. Välillä $[-d_i, 0]$ ei ole varausta, joten sähkökenttä on vakio, ja voidaan merkitä $F(x)=F(0^-)=F_{sA}$, missä F_{sA} on pintakenttä AlGaAs:n puolella heteroliitosta. Välillä $[-d_0, -d_i]$

$$F(x) = \frac{q}{\epsilon_A} \int_{-d_i}^x N_{DA}^+ dx + F_{sA} = \frac{qN_{DA}^+}{\epsilon_A} (x + d_i) + F_{sA} . \quad (53)$$

Kohdassa $x=-d_0$ vyön derivaatta on nolla. Tällöin $F(-d_0)=0$ ja F_{sA} :lle saadaan lauseke

$$F_{sA} = \frac{qN_{DA}^+}{\epsilon_A} (d_0 - d_i) . \quad (54)$$

Kenttä on nyt

$$F(x) = \frac{qN_{DA}^+}{\epsilon_A} (x + d_0) \quad ; \quad -d_0 \leq x \leq -d_i . \quad (55)$$

Välillä $[-d_A, -d_0]$

$$F(x) = \frac{q}{\epsilon_A} \int_{-d_0}^x N_{DA}^+ dx + C = \frac{qN_{DA}^+}{\epsilon_A} (x + d_0) + C . \quad (56)$$

Ehto $F(-d_0)=0$ seuraa, että integroimisvakio C on nolla. AlGaAs:n sähkökenttä on siten

$$F(x) = \begin{cases} \frac{qN_{DA}^+}{\epsilon_A} (d_0 - d_i) & ; \quad -d_i \leq x \leq 0 \\ \frac{qN_{DA}^+}{\epsilon_A} (x + d_0) & ; \quad -d_A \leq x < -d_i . \end{cases} \quad (57)$$

Potentiaali saadaan lauseesta $F(x) = -\nabla V(x)$. Nollakohdaksi voidaan valita AlGaAs:n pinta kohdassa $x=0^-$.

Välillä $[-d_i, 0]$

$$V(x) = -\int_0^x F_{sA} dx = -F_{sA} x , \quad (58)$$

ja välillä $[-d_A, -d_i]$

$$\begin{aligned}
V(x) &= - \int_{-d_i}^x \frac{qN_{DA}^+}{\epsilon_A} (x + d_0) dx + F_{sA} d_i \\
&= - \frac{qN_{DA}^+}{2\epsilon_A} (x^2 + 2d_0x + d_i^2) .
\end{aligned} \tag{59}$$

Seostetun alueen potentiaali on siis paraabeli. Sähkökentän nollakohta d_0 ratkeaa yhtälöstä (47),

$$\begin{aligned}
qn_s &\approx \epsilon_A F_{sA} \\
\Rightarrow \\
n_s &= N_{DA}^+ (d_0 - d_i) \\
d_0 &= \frac{n_s}{N_{DA}^+} + d_i .
\end{aligned} \tag{60}$$

Potentiaali Shottky-liitoksen AlGaAs:n puolella $V(-d_A)$ saadaan sijoittamalla yhtälö (60) yhtälöön 59,

$$\begin{aligned}
V(-d_A) &= - \frac{qN_{DA}^+}{2\epsilon_A} (d_A^2 - 2d_i d_A + d_i^2 - 2d_A \frac{n_s}{N_{DA}^+}) \\
&= q \frac{d_A}{\epsilon_A} n_s - \frac{qN_{DA}^+}{2\epsilon_A} (d_A - d_i)^2 \\
&= q \frac{d_A}{\epsilon_A} n_s - V_p ,
\end{aligned} \tag{61}$$

missä V_p :llä merkittiin AlGaAs-kerroksien yli vaikuttavaa potentiaaliero, kun elektronikaasun pintatiheys n_s on nolla. (Pinch-off-potentiaali).

Pintatiheys n_s voidaan nyt kirjoittaa potentiaalien funktiona,

$$qn_s = \frac{\epsilon_A}{d_A} (V(-d_A) + V_p) . \tag{62}$$

$V(-d_A)$ on toisaalta kuvan 9 perusteella

$$V(-d_A) = \frac{\Delta E_c - E_F}{q} + V_G - \Phi_B , \tag{63}$$

joten

$$qn_s = \frac{\epsilon_A}{d_A} \left[V_G - (\phi_B - V_p - \frac{\Delta E_c - E_F}{q}) \right]$$

$$= \frac{\epsilon_A}{d_A} (V_G - V_{\text{off}}) , \quad (64a)$$

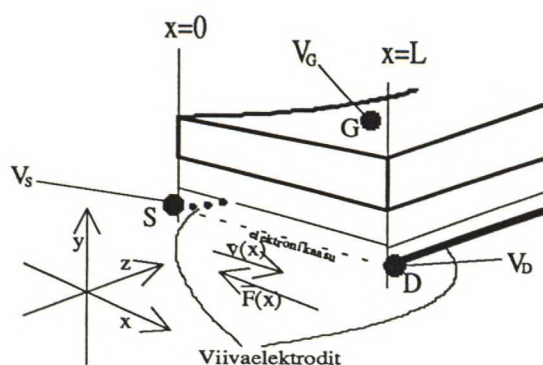
missä V_{off} :lla merkittiin sitä hilan potentiaalia, jolla Shottky-liitoksen AlGaAs:n puolelle aiheutetaan pinch-off-potentiaali. Yhtälö (64a) ei vielä ole kovin käyttökelpoinen, sillä oikealla puolella esiintyvä fermienergia riippuu vielä pintakonsentraatiosta n_s . Pintakonsentraation laskemiseksi pitää jälleen suorittaa tasapainotus yhtälöiden (33) ja (64a) välillä, mikä onnistuu vain iteroimalla. Kun $n_s > 5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, voidaan kuitenkin taas suorittaa yhtälön (49) mukainen fermienergian E_F linearisointi, joka sijoitettuna yhtälöön (64a) tuottaa suoraviivaisen laskun jälkeen yhtälön

$$qn_s = \frac{\epsilon_A}{d_A + \Delta d} \left[V_G - (\phi_B - V_p - \frac{\Delta E_c - \Delta E_F(T)}{q}) \right] , \quad (64b)$$

missä Δd on yhtälön (52) mukainen korjaustermi.

Yhtälöstä on nähtävissä kanavan pintavarauksen qn_s kapasitanssilain mukainen riippuvuus hilapotentiaalista. Transistorin hilalle tuotu potentiaali määrää lineaarisesti kanavan varauksen, ja johdettua mallia kutsutaankin heteroliitoksen lineaariseksi varausohjausmalliksi (linear charge control model).

3.2 Tasavirtaominaisuudet



Kuva 10: Ideaalinen transistori

Kuvassa 10 elektronikaasu on kontaktoitu viivaelektrodeilla ulkoiseen piiriin. Elektronikaasu on poistettu kaikkialta, paitsi elektrodien välistä. Elektrodit on nimetty lähteeksi (source, S) ja nieluksi (drain, D). Koko rakenteen päällä on hilaelektrodi (gate, G). Lähteen ja nielun välille on asetettu potentiaaliero $V_{DS} = V_D - V_S$. Elektronikaasu muodostaa lähteen ja nielun välille virtakanavan. Kanavan potentiaali on $V_c(x)$

reunaehdoin $V_c(S) = V_S$ ja $V_c(D) = V_D$.

Efektiiivinen hilajännite on nyt $V_{gc}(x) = V_G - V_c(x)$, ja kanavavarauksen yhtälö (64a) muuttuu muotoon

$$qn_s = \frac{\epsilon_A}{d_A} (V_G - V_c(x) - V_{\text{off}}) . \quad (65)$$

Olkoon kanavan pituus L , leveys Z ja paksuus mielivaltaisen pieni y . Kanavavirta I_{DS} on

$$I_{DS} = J_{DS} A = qnv(x)A, \quad (66)$$

missä $v(x)$ on elektronin keskimääräinen nopeus kohdassa x , $n = \frac{n_s}{y}$ ja $A = yZ$. Sijoittamalla

(66):een saadaan

$$I_{DS} = qn_s Z v(x). \quad (67)$$

Keskimääräinen nopeus $v(x)$ riippuu sähkökentästä $F(x)$. Elektroni saa kentältä energiaa ja sen nopeus pyrkii kasvamaan. Eri sirontaprosessien todennäköisyys kuitenkin kasvaa elektronin energian kasvaessa, ja lopulta ajaututaan tilanteeseen, jossa elektronin sirontojen välissä kentältä saama keskimääräinen energialisäys kompensoituu sironnoissa. Nettotuloksena elektronin nopeus on jokin kentästä riippuva vakio.

Karkeimpana approksimaationa voidaan olettaa, että nopeus riippuu lineaarisesti kentästä johonkin kriittiseen kentän arvoon $F = F_c$ saakka. Suuremmilla kentän arvoilla nopeus kyllästyy arvoon $v_{sat} = v(F_c)$. Sirontojen yhteisvaikutus tulkitaan siis pienillä kentillä kentästä riippumattomaksi vakioksi. Kriittistä kenttää suuremmilla arvoilla sirontojen yhteisvaikutus kasvaa samassa suhteessa kentän kanssa ja keskimääräinen nopeus kyllästyy.

Nyt

$$v(x) = \begin{cases} \mu F(x) & ; F(x) \leq F_c \\ \mu F_c & ; F(x) > F_c, \end{cases} \quad (68)$$

missä μ on nopeuden ja kentän välinen verrannollisuuskerroin.

Virtatarkastelu voidaan nyt jakaa eri tapauksiin kentän suuruuden mukaan.

Kanavan potentiaali $V_c(x)$, kun $F(x) < F_c$, ratkeaa sijoittamalla (65) ja (68) yhtälöön (67), käyttämällä hyväksi lausetta $F(x) = -\nabla V(x)$ ja integroimalla,

$$\begin{aligned} \int_0^x I dx &= \frac{\epsilon_A}{d_A} Z \mu \int_{V_s}^{V_c(x)} [(V_G - V_{off}) - V_c] dV_c \\ \Rightarrow \\ I x &= \frac{\epsilon_A}{d_A} Z \mu \left[(V_G - V_{off})(V_c(x) - V_s) - \frac{1}{2} V_c^2(x) + \frac{1}{2} V_s^2 \right] \\ \Rightarrow \\ V_c(x) &= (V_G - V_{off}) - \sqrt{(V_G - V_{off})^2 - 2 \left[\frac{I d_A}{\epsilon_A Z \mu} x + (V_G - V_{off}) V_s \right] + V_s^2}. \end{aligned} \quad (69)$$

Sijoittamalla saadaan $V_c(0)=V_s$, kuten pitikin. Vastaavasti täytyy olla $V_c(L)=V_D$. Nyt virta voidaan kirjoittaa elektrodipotentiaalien funktiona,

$$I = \frac{\epsilon_A Z \mu}{d_A L} \left[V_D (V_G - V_{\text{off}}) - \frac{1}{2} V_D^2 - V_s (V_G - V_{\text{off}}) + \frac{1}{2} V_s^2 \right] . \quad (70)$$

Lauseke (70) pätee, kun $F(x) < F_c$. Lausekkeesta voidaan johtaa myös kyllästysvirran lauseke asettamalla virran derivaatta V_D :n suhteen nolaksi, kun V_s on vakio. Kyllästysvirraksi I_s saadaan

$$I_s = \frac{\epsilon_A Z \mu}{2 d_A L} [V_G - V_{\text{off}} - V_s]^2 . \quad (71)$$

Galliumarsenidissa kriittinen sähkökenttä F_c on kuitenkin niin pieni, että virta tavallisesti kyllästyy nopeuden kyllästymisen ansiosta pienemmällä virroilla kuin yhtälöstä (71) laskettu I_s .

Kanavan sähkökenttä $F(x)$ saadaan derivoimalla potentiaali yhtälöstä (69),

$$|F(x)| = \frac{dV_c(x)}{dx} = \frac{Id_A}{\epsilon_A Z \mu} \left[(V_G - V_{\text{off}})^2 - 2 \left[\frac{Id_A}{\epsilon_A Z \mu} x + (V_G - V_{\text{off}}) V_s \right] + V_s^2 \right]^{\frac{1}{2}} . \quad (72)$$

Kenttä kasvaa nieluun päin mentäessä ja on suurin kohdassa $x=L$. Kun jännitettä V_{DS} kasvatetaan, virta kasvaa, ja riittävän isolla virralla $F(L) > F_c$. Tällöin virta kyllästyy kanavan nielun (D) puoleisessa päässä elektronien nopeuden $v(x)$ kyllästymisen vuoksi. Hyvin pienillä jännitteillä V_{DS} virta $I \sim 0$, ja kentän lauseke sievenee muotoon

$$F \approx \frac{Id_A}{\epsilon_A Z \mu} \frac{1}{(V_G - V_{\text{off}} - V_s)} . \quad (73)$$

Transistori toimii tällöin kuin säädettävä vastus, jonka resistanssi on

$$R = \frac{1}{I} \int_0^L F dx = \frac{L d_A}{\epsilon_A Z \mu (V_G - V_{\text{off}} - V_s)} . \quad (74)$$

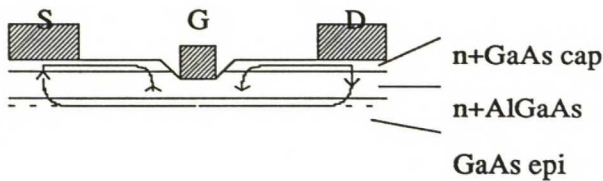
Nopeuskyllästynyt virta saadaan yhtälöstä (72), kun merkitään $F(L)=F_c$. Virralle I_s saadaan toisen asteen yhtälö,

$$I_s^2 + \frac{2 \epsilon_A Z \mu F_c^2 L}{d_A} I_s - \left(\frac{\epsilon_A Z \mu F_c}{d_A} \right)^2 [(V_G - V_{\text{off}})^2 - 2(V_G - V_{\text{off}}) V_s + V_s^2] = 0 ,$$

josta

$$I_s = \frac{\epsilon_A Z \mu V_s}{d_A} \left[-F_c L + \sqrt{F_c^2 L^2 + (V_G - V_{\text{off}} - V_s)^2} \right] . \quad (75)$$

Ga-vakansseihin lämpökäsittelyn aikana. Ge on GaAs:ssa n-tyyppin seostusatomi, joten GaAs seostuu metallin alta hyvin voimakkaasti, ja tunneloiva kontakti syntyy. Seostuminen alkaa jo ennen AuGe:n eutektista lämpötilaa, jolloin metalli on vielä kiinteässä faasissa. Tällöin puhutaan sintrauksesta (sintering). Nestefaasissa tapahtuvan kontaktoitumisen ongelmana on metallin pintajännityksestä aiheutuva 'palloutuminen'. Tätä ehkäistään usein ohuella nikkelipäällyksellä. Kokeellisesti on myös todettu, että ohut Ni-kerros metallin ja puolijohteen välissä edesauttaa metallin tarttuvuutta ja kontaktin muodostumista. GaAs/Ni/AuGe/Ni/Au-kerrosrakenteen käyttäytymistä on tutkittu viitteessä [26]. Toistettava ja pieniohminen kontakti saatiin metallien paksuuksilla 50Å/1000Å/300Å/500Å ja 2 minuutin lämpökäsittelyllä 460°C:ssa (RTA). Lämpökäsittelyssä Au, Ga ja As diffusoituivat pintaa kohti samalla kun Ge ja Ni tunkeutuivat GaAs:iin. Käsittelyn päättyessä metalliseoksessa havaittiin NiAs(Ge)- ja AuGa-nokareita. Hyvä kontakti yhdistettiin NiAs(Ge)-nokareisiin puolijohteen ja seoksen rajalla. Kontaktiresistanssi R_C riippuu NiAs(Ge)-nokareiden koosta ja lukumäärästä suhteessa 'huonoihin' AuGa-nokareisiin [26],[27]. Kuvatulla menetelmällä kontaktiresistanssiksi saatiin $R_C = 0,1 \Omega\text{mm}$. Nokareet tunkeutuvat tyypillisesti noin 100 nm syvyydelle puolijohteeseen [27], [28].



Kuva 12: Kaksikerrosmallin mukainen virrankulku

Matalan kontaktin tapauksessa johdinmetallin ja aktiivisen kanavan välinen resistanssi voidaan laskea kaksikerrosmallilla (kuva 12) [25]. Mallin kaksi kerrosta ovat n^+ GaAs-pintakerros ja elektronikaasu. Näiden välissä on AlGaAs, joka oletetaan täysin tyhjentyneeksi vapaista varauksenkuljettajista. AlGaAs-kerros korvataan ylimenoresistanssilla $\rho_{12} (\Omega\text{mm}^2)$ GaAs:sta elektronikaasuun.

Kun merkitään

$$r_{s1} = \text{pintakerroksen ominaisresistanssi} \quad (\Omega) \quad (1)$$

$$r_{s2} = \text{elektronikaasun ominaisresistanssi} \quad (=1/(q\mu n_s)) \quad (\Omega) \quad (2)$$

$$\rho_{12} = \text{AlGaAs:n ylimenoresistanssi} \quad (\Omega\text{mm}^2) \quad (3)$$

$$R_{C1} = \text{kontaktiresistanssi johdinmetallista } n^+\text{GaAs:iin} \quad (\Omega\text{mm}) \quad (4)$$

$$R_{C2} = \text{kontaktiresistanssi johdinmetallista elektronikaasuun} \quad (\Omega\text{mm}) \quad (5)$$

$$2L = \text{etäisyys lähteestä nieluun} \quad (\text{mm}) \quad (6)$$

$$L_{SG} = \text{etäisyys lähteestä hilaan} \quad (\text{mm}) \quad (7)$$

saadaan hilattomalle lähde-nieluparille nielun ja lähteen väliseksi resistanssiksi R_{NG} (Ωmm) [25]

$$R_{NG} = \frac{1}{r_{s1} + r_{s2}} \left\{ R_{c1}r_{s2} + R_{c2}r_{s1} + 2r_{s1}r_{s2}L + (R_{c2}r_{s1} - R_{c1}r_{s2}) \left(\frac{(r_{s1} - r_{s2})S + (R_{c1} - R_{c2})kC}{(r_{s1} + r_{s2})S + (R_{c1} + R_{c2})kC} \right) \right\},$$

missä

$$\begin{aligned} k &= \left[\frac{(r_{s1} + r_{s2})}{\rho_{12}} \right]^{\frac{1}{2}} \\ S &= \sinh(kL) \\ C &= \cosh(kL) \end{aligned} \quad (76)$$

Kun AlGaAs-kerros häivytetään ($\rho_{12}=0$), yhtälö palautuu muotoon

$$R_{NG} = 2R_c^{\text{eff}} + 2r_s^{\text{eff}}L,$$

missä

$$\begin{aligned} R_c^{\text{eff}} &= \frac{R_{c1}R_{c2}}{R_{c1} + R_{c2}} \\ r_s^{\text{eff}} &= \frac{r_{s1}r_{s2}}{r_{s1} + r_{s2}} \end{aligned} \quad (77)$$

Symmetrisessä transistorirakenteessa, jossa $n^+\text{GaAs}$ -pintakerros on poistettu hilaelektrodin alta, saadaan täysin avatun kanavan tapauksessa lähteen ja kanavan keskikohdan väliselle parasiittiselle resistanssille R_{par} (Ωmm) [25] yhtälö

$$R_{\text{par}} = r_s^{\text{eff}}L + \frac{1}{(r_{s1} + r_{s2})} \frac{\alpha + \beta C + \gamma kS}{(r_{s1} + r_{s2})C + (R_{c1} + R_{c2})kS},$$

missä

$$\begin{aligned} \alpha &= 2r_{s2}(R_{c2}r_{s1} - R_{c1}r_{s2}) \\ \beta &= 2r_{s2}^2R_{c1} + (r_{s1}^2 + r_{s2}^2)R_{c2} \\ \gamma &= (r_{s1} + r_{s2})R_{c1}R_{c2} + r_{s2}^2\rho_{12} \end{aligned} \quad (78)$$

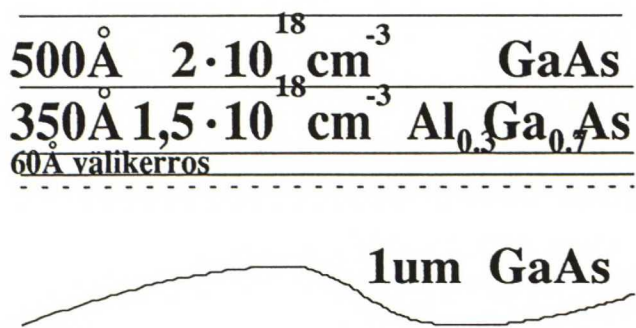
Jälleen, kun $\rho_{12}=0$, $R_{\text{par}} = R_c^{\text{eff}} + r_s^{\text{eff}}L$.

Viitteessä [25] annetut lukuarvot kuvan (13a) mukaiselle heteroliitosrakenteelle on esitetty taulukossa 1. Kuvassa (13b) on esitetty annetuilla lukuarvoilla kaavasta (78) laskettu

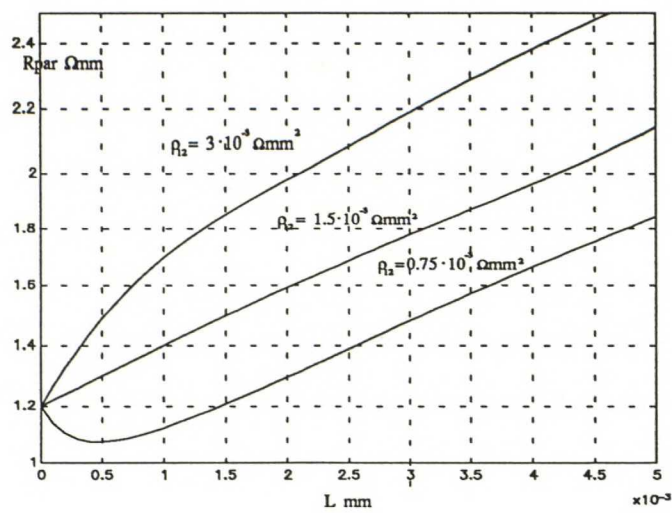
parasiittinen lähderesistanssi R_{par} lähteen ja kanavan keskikohdan välisen etäisyyden L funktiona, kun parametrina on AlGaAs:n ylimenoresistanssi ρ_{12} . Sarjavastus voi kuvan mukaisesti myös pienentyä välimatkan L kasvaessa. Näin tapahtuu, kun hilan ja lähteen väliin jäävän pinta-alan kasvaessa AlGaAs-kerroksen aiheuttama resistanssi poikittaiselle virralle pienenee nopeammin kuin välimatkan kasvusta aiheutuva resistanssi kerrosten suuntaiselle virralle kasvaa.

TAULUKKO 1:

R_{C1} (Ωmm)	R_{C2} (Ωmm)	r_{S1} (Ω)	r_{S2} (Ω)	ρ_{12} (Ωmm^2)
0.255	1.2	216	1164	$1.5 \cdot 10^{-3}$



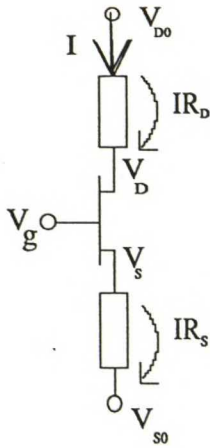
Kuva 13a : Kaksikerrosmallin esimerkkitarkasteluissa käytetty heteroliitosrakenne.



Kuva 13b: Kaksikerrosmallin mukainen parasiittinen lähderesistanssi R_{par} (Ωmm) lähteen ja kanavan keskikohdan välisen etäisyyden L (mm) funktiona, kun parametrina on AlGaAs-kerroksen ylimenovastus ρ_{12} .

3.4

Epäideaalisuuksien vaikutus transistorin toimintaan



Kuva 14:

Sarjaresistanssien vaikutus

Sarjavastus

Lähteen ja nielun sarjaresistanssien ansiosta elektrodipotentiaalit V_S ja V_D riippuvat paitsi ulkoisista potentiaaleista V_{S0} ja V_{D0} , myös virrasta I (kuva 14),

$$\begin{aligned} V_S &= V_{S0} + R_S I \\ V_D &= V_{D0} - R_D I \end{aligned} \quad (79)$$

Aktiivisen kanavan yli vaikuttava jännite $V_{DS} = V_D - V_S$ jää siten pienemmäksi, ja nopeuden kyllästymisen vaatiman kriittisen kentän F_c saavuttaminen vaatii nyt suuremman ulkoisen jännite-eron. Sijoittamalla V_S yhtälöstä (79) yhtälöön (75) saadaan nopeuskyllästyneen virran I_s lausekkeeksi kun $V_{S0} = 0$

$$I_s = \frac{\beta}{1 - \beta^2 R_s^2} \left[-(F_c L + \beta R_s (V_g - V_{off})) + \sqrt{F_c^2 L^2 + (V_g - V_{off})^2 + 2\beta F_c L R_s (V_g - V_{off})} \right],$$

missä

$$\beta = \frac{Z \epsilon_A v_s}{d_A} \quad (80)$$

3.5

Tyhjennysalueapproksimaation pätevyys

Tyhjennysalueapproksimaatio on käyttökelpoinen sillä hilajännitealueella, jolla elektronikaasun tiheys noudattaa yhtälön (64a) mukaista kapasitanssilakia. Kun $V_G < V_{off}$, seostettu AlGaAs on kokonaan tyhjentynyt metalliin. Jännitettä kasvatettaessa elektroneja alkaa riittää myös GaAs:n puolelle, jossa olevat akseptorit alkavat ionisoitua. Elektronien keräytyminen rajapintaan on vielä heikkoa. Hila-kanava -kapasitanssi, joka on kääntäen verrannollinen elektronien ja hilametallin keskimääräiseen etäisyyteen, on vielä pieni. Estosuuntaisen jännitteen edelleen pienentyessä elektronien keskittyminen heteroliitokseen voimistuu. Kapasitanssi kasvaa nopeasti. Kun rajapintaan kerääntyneiden elektronien lukumäärä on kasvanut riittävästi suhteessa kauempana harhaileviin elektroneihin, kapasitanssi ei enää kasva. Estosuuntaisen jännitteen vieläkin pienentyessä metallista vapautuvat elektronit päätyvät kaikki rajapintaan, ja ollaan yhtälön (64b) mukaisessa lineaarisessa kapasitanssimallissa.

Estosuuntaisen jännitteen pienentäminen pienentää $(\phi_B - V_g)$:tä kuvassa 9. Jossakin vaiheessa fermienergia nousee riittävän lähelle AlGaAs:n donoritiloja, ja ne alkavat neutraloitua. Tällöin elektronien keskimääräinen etäisyys alkaa uudestaan pienentyä, eikä lineaarinen

kapasitanssimalli enää päde. Kun AlGaAs:n varausneutraali alue muodostuu, elektronikaasun pintatiheys kyllästyy yhtälön (51) mukaiseen arvoon. Hilajännitteen muutoksesta aiheutuva varauksenvaihto tapahtuu nyt AlGaAs:n ja metallin välillä. Vapaiden elektronien määrä AlGaAs:ssa riippuu donoritilojen aktivointienergiasta ja lämpötilasta yhtälön (22) mukaisesti. Sopivalla hilajänniteellä AlGaAs:iin muodostuu lopulta johtava kanava. Tämän jälkeen lähteestä nieluun on kaksi erillistä virtatietä. Jos transistori biasoidaan siten, että kuvattu 'parasiittinen MESFET' muodostuu, elektronikaasun hyvistä virrankuljetusominaisuuksista ei ole enää hyötyä. Hilaohjaus vaikuttaa vain AlGaAs-virtakomponenttiin, ja elektronikaasu edustaa pientä vastusta huonolaatuisen AlGaAs-MESFET:n lähteestä nieluun.

4. Heteroliitostransistorin valmistaminen

4.1 GaAs -prosessin päävaiheet

4.1.1 Pinnan puhdistus

Puolijohdekomponenttien pienet mitat asettavat vaatimuksia valmistusympäristön puhtaudeksi. Puhdastilat jaetaan luokkiin sen mukaan, paljonko tilan ilmassa on likahiukkasia tilavuusyksikössä. Luokan 100 tiloissa on keskimäärin 100 läpimitaltaan 0,5µm tai suurempaa hiukkasta kuutiojalassa. Suurin hiukkaslähde on ihminen. Puolijohdepala toimii myös itse hiukkaslähteenä murentuessaan säilytyslaatikossaan liian kovakouraisen käsittelyn yhteydessä. Hiukkasten lisäksi puolijohdekiekon pinnalla on usein ylimääräisiä kalvoja, kuten natiivioksidgeja, rasvaa ja resistijäämiä. Pinnan puhdistus onkin valmistusprosessissa usein toistuva ja erittäin tärkeä vaihe.

Ennen epitaksista kasvatusta kiekon pinnan 'puhdistus' suoritetaan syövyttämällä pinta pois muutaman mikrometrin syvyydeltä esim. rikkihapolla. Tasainen syöpyminen vaatii erityisen puhtaan pinnan. Rikkihappokäsittelyä edeltävän 'esipesun' vaiheet ovat esimerkiksi

trikloorietyleni	+ ultraääni 5 min
asetoni	+ ultraääni 5 min
metanoli	+ ultraääni 5 min
deionisoitu vesi	+ ultraääni 5 min
huuhtelu juoksevan veden alla 5 min.	

Ultraääni viittaa pesuun erityisessä ultraäänialtaassa. Ultraäänipesuallas on tyypillisesti metallinen vesiallas, jonka sisään mahtuu varsinainen pesuastia. Altaan pohjaan on kiinnitetty kvartsikide. Kiteen värähtely välittyy vesivaipan välityksellä pesuastiassa olevaan pesunesteeseen ja sitä kautta kiekkoon.

Kerrosten epitaksisen kasvatuksen jälkeen ei enää sallita minkäänlaista pinnan vaurioittamista pesun yhteydessä. Pesu ei saa myöskään aiheuttaa sellaisia kemiallisia reaktioita, joiden seurauksena olisi jonkin epäpuhtauskalvon kasvu pinnalle.

Hiukkasten poisto

Irtonaisia hiukkasia voidaan poistaa mekaanisesti typpipuhalluksella ja ultraäänipesulla deionisoidussa vedessä. Vesipesun ongelmana on veden pinnalle mahdollisesti kertyvä hiukkasmatto, joka tarttuu heti takaisin pintaan, kun kiekko nostetaan ylös. Tämän vuoksi pesua jatketaan juoksevan veden alla, jolloin suurin osa matosta huuhtoutuu pois. Kiekko kuivataan typpipuhalluksella siten, että vesikalvo liukuu kiekon reunalle ja kuivaa siellä. Näin kalvossa vielä olevat hiukkaset joutuvat paikkaan, jossa niistä on vähiten haittaa.

Kalvojen poisto

Resistit ovat valoherkkiä aineita, joita käytetään pintaa kuvioitaessa. Yleisimmin käytetyt resistit liukenevat asetoniin. Tyypillinen resistin poistopesu on esim.

asetoni + ultraääni 5 min

deionisoitu vesi + ultraääni 5 min.

Joskus yksinkertainen liuotus ei riitä poistamaan resistijäämiä. Tällöin resisti voidaan polttaa pois happiplasmassa.

Hyvin yleinen puolijohteen pinnalla esiintyvä kalvoryhmä on erilaiset oksidit. Esimerkiksi galliumarsenidin pintaan kasvaa 30Å paksuinen oksidikerros neljän vuorokauden altistuksella huoneilmaan [29]. Arseenin oksidit kuten As_2O_3 ja As_2O_5 liukenevat hyvin veteen. Galliumin oksidit kuten Ga_2O_3 , $\text{Ga}_2\text{O}_3(\text{H}_2\text{O})$ ja Ga_2O liukenevat alkalisiin liuoksiin, ja vain heikosti happoihin [30]. Liukenemisnopeudet ovat tuntemattomia muuttujia. Komponenttivalmistuksen kannalta ohutkin oksidikerros on haitallinen monella tavalla. Prosessointiin liittyy usein suurten pinta-alojen syövytystä haluttuun syvyyteen. Mahdollinen oksidi tekee syövytyksestä epätasaisen ja huonosti toistettavan. Ohmisen kontaktin lejeerautuminen riippuu oleellisesti pinnan puhtaudesta. Hilaelektrodina käytetyn metalli-puolijohdeliitoksen Schottkyvallin korkeuden Φ_B on todettu kasvavan lineaarisesti oksidin paksuuden funktiona [29]. Lisäksi liitoksen läpilyöntijännite pienentyy, jos osa jännitteestä jää oksidin yli, jolloin tyhjennysalue puolijohteessa kaventuu. Myös Schottky-liitoksen virtayhtälössä

$$I = I_s e^{\frac{qV}{nk_B T}} \quad (81)$$

esiintyvä ideaalisuuskerroin n kasvaa oksidikerroksen paksuuden mukana. Kasvun on todettu liittyvän ennenkaikkea arseenin oksidien läsnäoloon liitoksessa [31].

Oksidien ohennusmenetelmät määräytyvät kokeellisesti ja vaihtelevat laboratoriosta toiseen. Usein käytetään suolahapon (HCl) tai ammoniumhydroksidin (NH_4OH) vesiliuoksia konsentraatioita ja käsittelyaikoja vaihdellen. GaAs:n märkäsyövytyksen kannalta hyväksi esikäsittelyvaiheeksi osoittautui resepti

$\text{NH}_4\text{OH} : \text{H}_2\text{O}$ 1 : 85 lyhyt upotus 20 sekuntia

huuhtelu juoksevan veden alla 5 sekuntia

$\text{HCl} : \text{H}_2\text{O}$ 1 : 1 lyhyt upotus 30 sekuntia

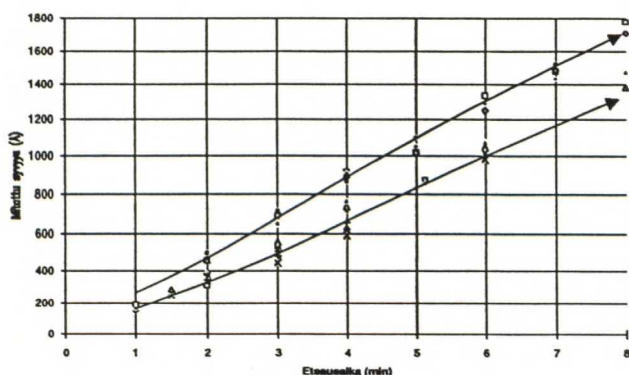
huuhtelu juoksevan veden alla 5 sekuntia

minkä jälkeen välittömästi etsaus. Suhteet viittaavat nesteiden tilavuussuhteisiin. NH_4OH -liuos oli 25 %:sta ($M=17,03 \text{ g/mol}$, $1 \text{ l} = 0,91 \text{ kg}$).

4.1.2 Märkäetsaus

Märkäetsauksella tarkoitetaan aineen pinnan poistamista nestemäisellä syövyttävällä aineella. Galliumarsenidin etsautumisprosessi on tavallisesti oksidoituminen, jota seuraa oksidin liukeneminen etsiin. Oksidoivana aineena on tavallisesti Br_2 , H_2O_2 , $\text{AgNO}_3/\text{CrO}_3$, HNO_3 tai NaOCl [30]. Etsautumisen tuloksena syntyvät yhdisteet eivät useimmiten liukene veteen, ja etsi sisältääkin jotain muuta liuotinta, kuten NH_4OH , NaOH , H_2SO_4 , HCl , HF , H_3PO_4 tai 'sitruhappoa' $\text{C}_3\text{H}_4(\text{OH})(\text{COOH})_3\text{H}_2\text{O}$. Etsin valintaperusteita ovat etsausnopeus ja etsautumisen isotrooppisuusaste eli riippuvuus kidesuunnasta. Etsi ei myöskään saa syövyttää tai turvottaa käytettyä resistiä liian voimakkaasti.

MODFET:ien valmistuksen kannalta oleellinen askel on komponenttien aktiivisen alueen rajaaminen. Seostamaton GaAs on käytännössä heikosti p- tyyppistä ja sen resistiivisyys on suuri. Kaksidimensioiden elektronikaasu muodostaa kuitenkin johtavan kerroksen kiteen sisään. Transistorin toiminnan kannalta on tärkeää poistaa elektronikaasu muualta paitsi lähteen ja nielun välistä, jossa hilaelektrodin potentiaalilla on merkitystä. Heteroliitos saadaan tuhottua etsaamalla kerrosrakenne pois aktiivisten alueiden ulkopuolelta. Jäljelle jääviä kukkuloita kutsutaan 'mesoiksi'. Etsattavan syvyyden rajaa toisaalta poistettavien kerrosten paksuus ja toisaalta metallointitekniikka. Jos johtimena käytetään puolijohteen pintaan höyrystettävää metallikalvoa on varmistuttava siitä, että metallointi pysyy yhtenäisenä ja riittävän paksuna myös mesaportaiden kohdalla. Ehto on helppo täyttää, jos pintaan osuva metallivuo ei ole erityisen suuntautunut, jolloin metallia saadaan myös pystysuorille seinämille. Eräissä metallointitekniikoissa käytetään kuitenkin suunnattua vuota, jolloin metallin paksuus käytännössä rajaa myös mesan syvyyden. Loivat mesa-alueiden reunat helpottavat metalloinnin onnistumista oleellisesti.



Kuva 15: GaAs:n ja AlGaAs:n etsautuminen

etsautumisnopeudet käytetyille etsille. Koepaloina oli MBE:llä kasvatetut seostamaton GaAs -näyte (ASA-196), seostamaton $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ -näyte (ASA-200) ja piiseostettu GaAs-näyte

Tässä diplomityössä käytetty GaAs- etsi oli 30% vetyperoksidin ($M=34,01 \text{ g/mol}$, $1 \text{ l}=1,11 \text{ kg}$) ja 50% sitruhapon seos tilavuussuhteessa 1:100. 50%:sta sitruhappoa saadaan liuottamalla 121g sitruhappokiteitä 100ml:aan vettä. Etsin lämpötila oli 22°C . Mesaportaiden tekemistä varten määritettiin GaAs:n ja $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$:

(ASA-205, $N_d=1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). Näytteisiin kuvioitiin $50\mu\text{m}$ leveitä resistiiviivoja $50\mu\text{m}$ välein, minkä jälkeen ne pilkottiin n. $5 \times 5 \text{ mm}$ paloiksi. Oksidikerros poistettiin kohdassa 4.1.1 kuvatulla tavalla, ja paloja etsattiin eri pituisia aikoja. Sitten resisti poistettiin ja etsattu syvyys mitattiin profilometrillä, jonka satunnaisvirhe oli luokkaa $\pm 100 \text{ \AA}$. Osa paloista sisälsi MBE -kasvatuksen yhteydessä tulleen pitimenjäljen, mikä mahdollisti syöpymän mittauksen sekä epikerroksesta että substraatista. Profilometrimittaus tehtiin useasta kohtaa joka palasta keskiarvoistuksen vuoksi. ASA-205 -paloilla testattiin samalla kokeen luotettavuutta tekemällä etsaus näytepareille, jolloin paloilla oli mahdollisimman identtiset etsausolosuhteet. Mittaustuloksista lasketut keskiarvot on koottu taulukkoon 2. Kuva 15 esittää tulokset graafisesti.

Taulukko 2: Etsautumiskokeen tulokset

ASA-196	1 min	2 min	3 min	4 min	5min 8 sek	6 min
syvyys \AA	epi:177 sub:161	epi:309	epi:497 sub:501	epi:618 sub:639	epi:863	epi:1045 sub:1006

ASA-200	1 min	2 min	3 min	4 min	5 min	6 min	7 min	8 min
syvyys \AA	<200	epi:472 sub:411	epi:691 sub:620	epi:894 sub:739	epi:1045	epi:1279	epi:1479	epi:1727 sub:1430

ASA-205	1 min 30 sek	1 min 30 sek	2 min	2 min
syvyys \AA	epi:260	epi:269	epi:351	epi:363

Kuvaan 15 on piirretty myös keskiarvoistamattomiin mittaustuloksiin pienimmän neliösumman menetelmällä sovitetut suorat. GaAs etsautuu yhtälön

$$\text{etsauma} = (166,71 \cdot t(\text{min}) + 4,3) \text{ \AA} \pm 100 \text{ \AA} \tag{82}$$

ja $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ yhtälön

$$\text{etsauma} = (206,35 \cdot t(\text{min}) + 52,8) \text{ \AA} \quad + \quad 100 \text{ \AA} \quad (83)$$

mukaisesti. Etsautumisnopeudet ovat siten GaAs:lle 2,78Å/s ja Al_{0.3}Ga_{0.7}As:lle 3,44Å/s.

4.1.3 Valolitografia

Litografialla tarkoitetaan menetelmää, jolla maskissa olevat geometriset kuviot siirretään kuvioitavan materiaalin pinnalle levitettyyn ohueen säteilylle herkkään kalvoon (resisti). Kuvioden siirto tapahtuu asettamalla maski resistikerroksen päälle ja altistamalla resistikerros säteilylle ('valottamalla') maskissa olevien aukkojen kautta. Tavallisimmin käytetty säteily on ultraviolettivalo. Valotuksen jälkeen resisti 'kehitetään', jolloin resistityypistä riippuen joko valotettu tai valottamaton resistinosa liukenee kehitteeseen. Resistin alla olevaa materiaalia voidaan nyt käsitellä eri tavoin resistissä olevien aukkojen kautta.

Resistit jaetaan positiivisiin ja negatiivisiin resisteihin. Positiivinen resisti tulee valotettaessa liukoisemmaksi ja negatiivinen vähemmän liukoiseksi, joten positiivinen resisti toistaa maskissa olevat kuviot positiivisena (maskin aukot toistuvat resistin aukkoina) ja negatiivinen resisti negatiivisena. Näiden lisäksi on kehitetty resistejä, joille valotetun kuvan 'polariteetti' voidaan tarvittaessa kääntää sopivalla käsittelyllä. Eräs tällainen resisti on AZ-5214 (TM American Hoechst Corporation). Positiiviset resistit koostuvat kolmesta osasta: valoherkkä osa (PAC, photoactive compound), kalvoa muodostava polymeeri (resin) ja liuotin (solvent). PAC:tä kutsutaan myös inhibiittoriksi, ja se määrää resistikalvon absorptio-ominaisuudet. Resiini toimii sidosaineena, ja liuotin tekee seoksesta juoksevaa. Resistin levityksen jälkeen liuotinkomponentti poistetaan haihduttamalla.

Valolitografiaprosessin päävaiheet

1. Substraatin pinnan esikäsittely

Pinnan puhdistus suoritetaan kuten kohdassa 4.1.1 on kerrottu.

2. Resistin adheesiota parantava käsittely

Yleisesti käytetty tarttuvuutta parantava aine on *heksametyylidisilatsaani* (HMDS), joka on kirkas neste. Käsittely voidaan suorittaa esimerkiksi pitämällä kiekkoa HMDS-höyryssä n. 15 minuuttia.

3. Resistin levitys

Tavallisesti resisti levitetään spin-on-tekniikalla, jossa resisti valutetaan tasaisena nauhana kiekolle siten, että n. 2/3 kiekon pinnasta peittyy. Sen jälkeen kiekkoa pyöritetään spinnauslaitteessa, jolloin resisti leviää kiekon pinnalle tasaiseksi kerrokseksi. Kerroksen paksuus riippuu monesta parametrasta, mutta hyvänä approksimaationa voidaan paksuudelle T kirjoittaa kaava [32]

$$T = \frac{KP^2}{\sqrt{W}}, \quad (84)$$

missä

T =resistin paksuus mikrometreinä

K =vakio

P = resistin kuiva-aineprosentti

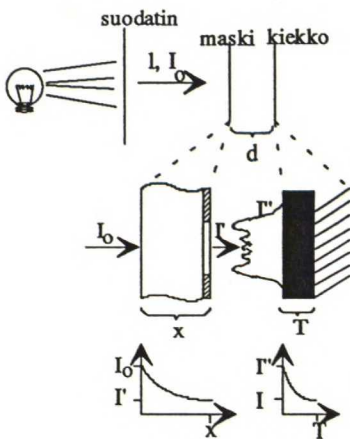
W =kierrosnopeus tuhansina kierroksina minuutissa

AZ-5214-resistille parametrien arvot ovat $P=0,263$ ja $K=40,77$, kun $1 \leq W \leq 6$.

4. Esipaisto

Esipaistossa resistoitua kiekkoa lämmitetään joko uunissa tai lämpölevyllä, jolloin suurin osa resistin liuotinkomponentista haihtuu. Resistin valoherkkyys kasvaa liuotinkomponentin osuuden pienentyessä. Esipaisto vaikuttaa myös resistikalvon adheesio-ominaisuuksiin, kehittymiseen ja viivanleveyteen, joten se on hyvin kriittinen vaihe resistin käsittelyssä.

5. Valotus



Kuva 16: Valotus

Valotuksella muutetaan resistin ominaisuuksia siten, että kuvan muodostaminen on mahdollista; esim. liukoisuus kehitteeseen muuttuu. AZ-5200-sarjan resistien erityisominaisuuksiin kuuluu lisäksi, että valottumisen yhteydessä muodostuu katalyyttiä, joka mahdollistaa ns. 'kuvan kääntämisen' (image reversal) tavanomaista kuvankääntöä vaivattomammin. Valotustapahtuman tärkeimmät osatekijät on esitetty kuvassa 16. Käytetyn valottimen emissiospektrin ja resistin absorptiospektrin on oltava toisiinsa sopivat. Resistin pintaan osuva valotusannos A' riippuu maskin pintaan osuvasta annoksesta A ($=I_0t$, missä I_0 =valon intensiteetti ja t valotusaika) ja maskin absorptio-ominaisuuksista. Diffraktio

maskikuvioista muuttaa intensiteettijakauman resistin pinnassa etenkin jos viivanleveys on pieni ja käytetään monokromaattista valonlähdettä. Resistin absorptio-ominaisuudet vaikuttavat vielä annokseen resistin sisäosissa. Toisaalta resistin absorptiokerroin on tyypillisesti myös annoksen funktio. Absorptiviteetin pieneminen johtuu PAC:n kulumisesta.

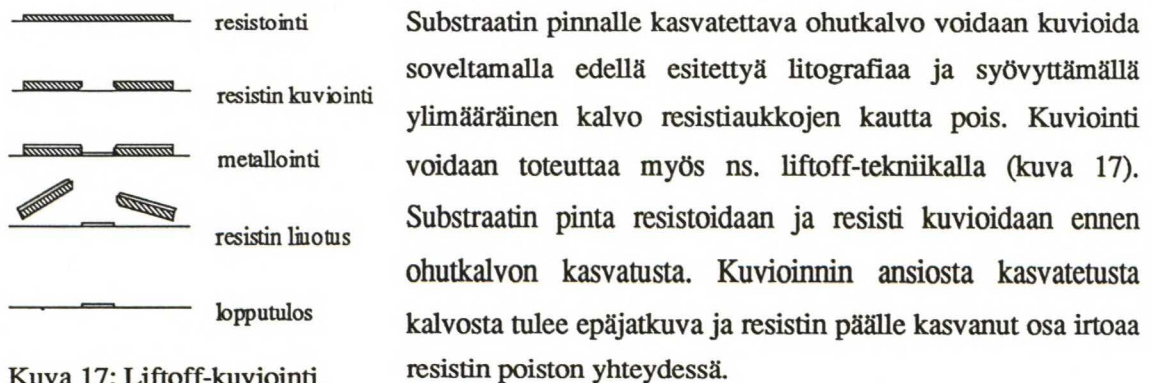
Resistin tilavuusalkion valottuminen riippuu sen absorboimasta annoksesta ja valotusreaktion 'kvanttihyötysuhteesta'; jokainen absorboitunut fotoni ei generoi valotusreaktiota. Resistin valottumisherkkyyttä voidaan kuvata 'valokemiallisella nopeudella', joka saadaan PAC:n loppuunkulumiseen vaaditun energia-annoksen käänteislukuna. Jos resistin absorptiokerroin

käytetyillä aallonpituuksilla on riittävän suuri, voidaan valotusannos resistin pinnassa valita sellaiseksi, että resistin pohjakerrokset jäävät alivalottuneiksi. Tästä seuraavaa liukoisuusgradienttia hyödynnetään viitessä [33] kuvatussa yksikerros-liftoff-prosessissa.

6. Kehitys

Kehiteneen tuodaan resistin pintaan tavallisesti joko suihkuttamalla (spraykehitys) tai upottamalla kiekko kehitealtaaseen (immersiokehitys). Positiivisen resistin kehittyminen on luonteeltaan pintarajoittunutta liukenemista, joten oleellisia parametreja ovat liukenemisnopeudet valotetuilla ja valottamattomilla alueilla ja erityisesti niiden erotus. Saavutettava viivakontrolli riippuu siitä, miten paljon resistiä ehtii liueta resistin läpikihittymiseen kuluva ajassa poistettavien alueiden ulkopuolelta. Läpikihittymisaika on mm. resistin paksuuden, valotusajan, kehitteen konsentraation, lämpötilan ja esipaisto-olosuhteiden funktio.

Liftoff- valolitografia



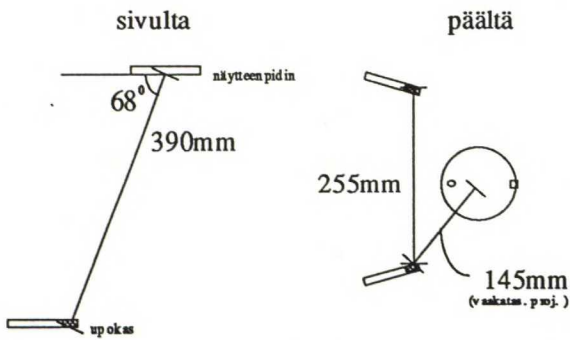
Kuva 17: Liftoff-kuviointi

Liftoff-tekniikka asettaa joitakin vaatimuksia resistin kuvioinnille ja ohutkalvon kasvatusvaiheelle. Kalvon epäjatkuvuuden varmistamiseksi resistin pitää olla riittävän paksu kalvoon verrattuna, ja aukkojen reunaprofiilin pitää olla kuvan 17 mukaisesti 'räystäsmäinen'. Kalvon kasvatusolosuhteiden pitää olla sellaiset, etteivät resistin ominaisuudet kärsi kasvatuksen yhteydessä; esimerkiksi lämpötilan pitää pysyä riittävän alhaisena. Kasvatusmenetelmäksi kelpaa vain sellainen, jossa tuleva ainesuihku on likimain pinnan normaalin suuntainen. Tyhjähöyrystys soveltuu hyvin liftoff-metallointiin.

Räystäsmäisen profiilin ('lipan') aikaansaamiseksi on kehitetty useita tekniikoita, kuten monikerrosresistointi ja resistin pinnan kemiallinen kovettaminen. Viite [33] esittelee positiivisen yksikerros-liftoff- prosessin AZ-5214-E -resistille. AZ-5200-sarjan resistit muodostavat valotuksen yhteydessä katalyyttiä, joka mahdollistaa ns. 'kuvankäännön' (image reversal) toteuttamisen tavanomaista vaivattomammin. Kuvan kääntäminen tarkoittaa alunperin liukoisemman resistinosan muuttamista vähemmän liukoiseksi, jolloin kehittämisen jälkeisestä resistikuvioista tulee alkuperäisen negatiivikuva. Liukoisuuden muuttuminen saadaan aikaan lämmöllä ('kääntöpaisto'). Tekniikan avulla tavanomainen negatiivinen resisti voidaan tarvittaessa korvata positiivisella resistillä, jolloin päästään eroon negatiivisille resisteille tyypillisistä ongelmista, kuten resistin paisuminen kehitettäessä.

Kuvankääntötekniikalla toteutettu yksikerrosprosessi perustuu resistin absorptio-ominaisuuksiin. Kun positiivista resistiä valotetaan ilman maskia hyvin vähän aikaa, resistin pinta muuttuu pohjaa liukoisemmaksi. Kääntöpaiston jälkeen myös liukoisuusgradientti on kääntynyt. Gradientti säilyy paistoa seuraavan tavanomaisen maskivalotusvaiheen läpi ja kehitettäessä saadaan kuvan 17 mukainen räystäsmäinen profiili.

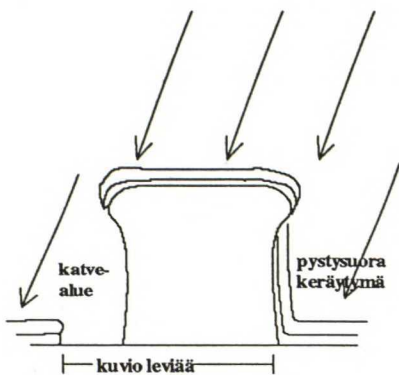
4.1.4 Liftoff- metallointi MBE:n metallointikammiossa



Kuva 18: Höyrystimen mittoja

MBE:hen liitetty metallointikammio on tarkoitettu lähinnä kasvatettavien puolijohdekerrosten 'in situ' -metallointiin. Puolijohdekierokko voidaan siirtää kasvatuskammioista metallointikammioon ilman, että kiekkoa tarvitsee välillä ottaa pois tyhjästä. Metalloitava pinta pysyy siten täysin puhtaana. In situ -metalloinnin kannalta riittää, että kiekon pintaan päästään kasvattamaan ohut suojaava metallikalvo,

jota voidaan sitten myöhemmin vahvistaa ja kuvioda jämerämmillä työkaluilla. Laittevalmistaja onkin tehnyt höyrystimen rakennetta yksinkertaistavia kompromisseja MBE:n metallointipäässä: höyrystettävää materiaalia sisältävät upokkaat on sijoitettu suhteellisen kauas kiekosta, ja metallivuot osuvat kiekon pintaan vinosti. Höyrystimen geometria on esitetty kuvassa 18. Vinon vuon vaikutus liftoff -metallointiin on puolestaan hahmoteltu kuvaan 19. Metallia kertyy resistin pystysuoralle seinämälle. Katvealueella metalliin jää selvä väli, josta on ongelmia mm. mesaportaan ylityksessä. Lisäksi kuvio levenee.



Kuva 19: Vinouden seurauksia

Kulmaa korjattiin näytteenpitimeen rakennetulla kallistuselimellä. Ongelmaksi jää kiekon suuntaaminen tarkasti upokasta kohti. Tavallisesti metallointi sisältää useita metallikerroksia ja kiekko joudutaan suuntaamaan välillä eri upokkaaseen. Käytännössä suuntaus ei koskaan ole täydellinen, ja pahimmassa tapauksessa unohtuu kokonaan tekemättä, jolloin metallointi epäonnistuu.

Metallin paksuutta mitataan kvartsikideanturilla, jonka resonanssitaajuus laskee kiteen pintaan tarttuvan metallikalvon massan kasvaessa. Paksuja kalvoja kasvatettaessa mittaustarkkuus kärsii. Toinen paksuutta rajoittava tekijä on metalloinnin 'hyötysuhde'. Jos oletetaan, että metallivuo leviää upokkaasta puolipallon muotoisesti, metallista saadaan 'talteen' 2 tuuman kiekolle 39 cm etäisyydellä vain noin 2 promillea. Käytännöllinen yläraja metalloinnin paksuudelle on 200-300 nanometriä.

4.1.5 Nitridointi

Piinitridiä Si_3N_4 käytetään toisaalta passivoivana kerroksena GaAs:n pinnalla ja toisaalta metallointikerrosten välisenä eristeenä kondensaattorirakenteissa. Nitridi kasvatetaan PECVD-reaktorissa (Plasma Enhanced Chemical Vapour Deposition), joka koostuu tyhjäkammioista, jossa on kaksi elektrodia. Kun toinen elektrodi on maadoitettu ja toiseen tuodaan suurtaajuinen jännite, elektrodien välille syntyy suurtaajuuskenttä. Kentän energia saa aikaan hehkupurkauksen kammioon johdettuun harvaan kaasuun. Näytteet asetetaan maaelektrodille ja kammioon johdetaan silaanin SiH_4 ja ammoniakkin NH_3 tai typen N_2 seosta. Kaasuplasman virittymisen jälkeen tapahtuvat kemialliset reaktiot, jotka johtavat hyvälaatuisen nitridikalvon kasvuun näytteiden pinnalle, tunnetaan vain osittain. Nitridointiprosessi optimoidaan kokeellisesti varioimalla esim. kammion painetta, lämpötilaa, kaasujen virtauksia ja kentän tehoa ja taajuutta.

4.1.6 Nitridin syövytys

Syövytys voidaan suorittaa kemiallisella plasmaetsauksella (KPE), joka on prosessina hyvin samanlainen kuin edellä mainittu PECVD. KPE:ssä plasman reaktiiviset yhdisteet syövyttävät nitridiä joko mekaanisesti tai kemiallisesti. Mekaanisessa etsautumisessa pintaan osuvat energiset ionit irrottavat pinnasta molekyylejä. Kemiallisessa etsautumisessa plasman kaasut reagoivat pinnan kanssa muodostaen kaasumaisia yhdisteitä. PECVD-nitridin etsaukseen KPE:llä voidaan käyttää esim. rikkiheksafluoridia SF_6 .

4.2 MODFET-prosessin kehitystyö

Prosessin kehitys tukeutui suoraan Elektronifysiikan laboratorion aikaisempaan osaamiseen: molekyyliuiskuepitaksiaa laboratoriossa on harjoitettu vuodesta 1986. GaAs-MESFET-prosessi kehitettiin vuonna 1990 [34]. GaAs/AlGaAs-liitoksen numeerista simulointia on tutkittu [21]. MODFET-prosessia varten kasvatettavia heteroliitosrakenteita voitiin siten optimoida numeerisesti, ja valmistustekniikkaa lainata soveltuvien osien GaAs-prosessista. Käytettävissä olleet prosessointi- ja analysointilaitteet on listattu liitteeseen 1.

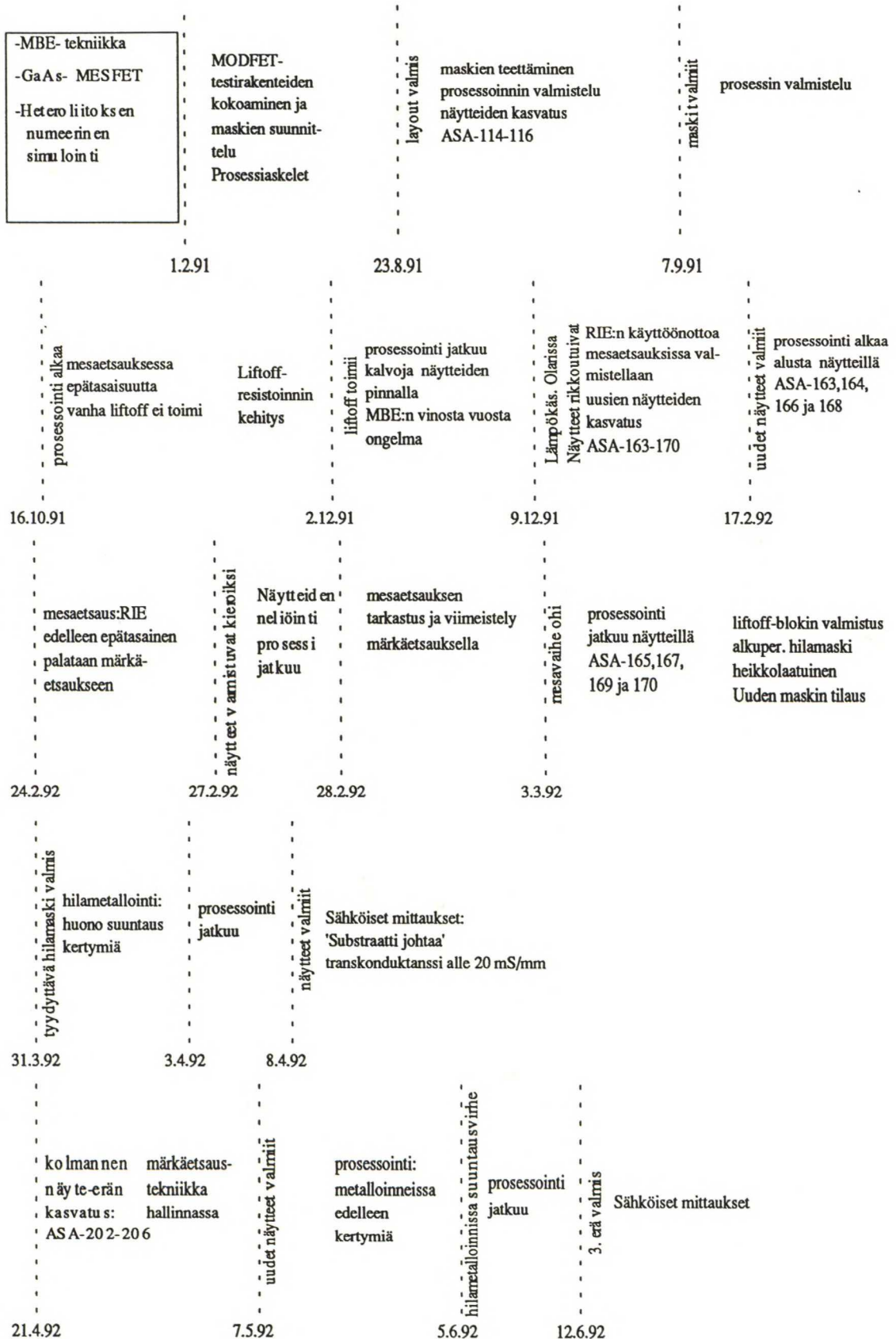
Prosessin kehittyminen on esitetty kronologisesti kuvassa 20. Ensimmäisessä vaiheessa lyötiin lukkoon transistorin suunnittelusäännöt (kuva 21), ja koottiin yhteensä 44 kpl sopiviksi katsottuja testirakenteita. Samanaikaisesti määrättiin prosessiaskel (liite 2). Testirakennesirun mitoiksi tuli $0,53 \times 0,47$ mm. Maskeissa sirun toistoväli oli $300\mu\text{m}$. Prosessoitavat näytteet olivat kahden tuuman kiekon neljänneksiä, jolloin yhteen näytteeseen mahtui noin neljä sirullista rakenteita. Testirakenteet on listattu liitteeseen 3 ja niistä koottu siru on esitetty liitteessä 4. Maskit piirrettiin kaupallisella layout-editorilla (ICED) ja teetettiin paikallisessa Terapixel OY:ssä. Maskisubstraatiksi valittiin kustannussyistä boorilasi.

Ensimmäisellä prosessointikerralla kartoitettiin valmistuksen tärkeimmät pullonkaulat, joiksi

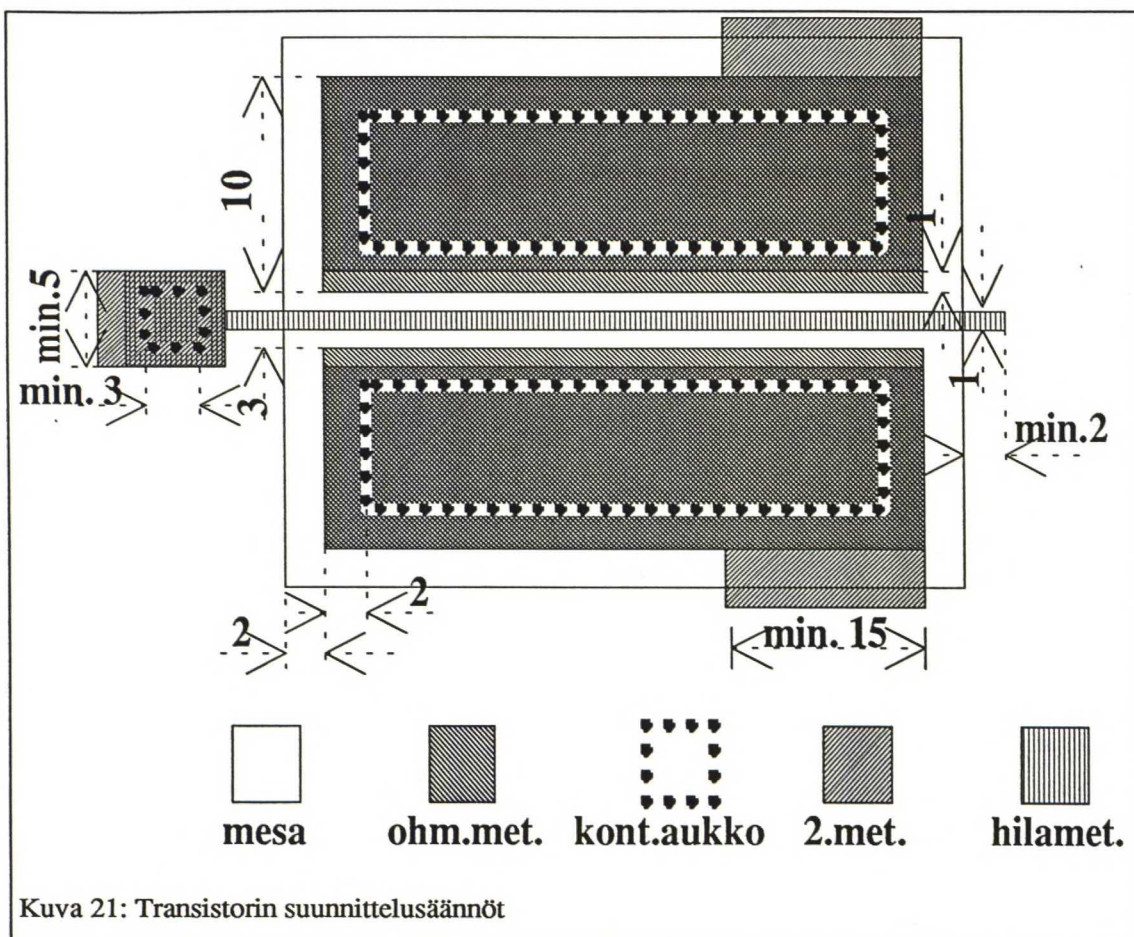
osoittautuivat liian optimistinen kuva käytetyn valolitografian resoluutiosta ja metallointi. Valolitografian parantamiseen käytettiin huomattavasti aikaa, mutta ongelmaksi jäivät hila-maskissa havaitut dimensiovirheet, joita ei onnistuttu kokonaan poistamaan. MBE:n metallointikammio oli alunperin helppo valinta, eikä sen soveltumattomuutta liftoff-metallointiin osattu heti nähdä. Käytetyn DUV-valottimen (liite 1) resoluutio on $0,4\mu\text{m}$ UV300-optiikalla. Tarkkaan resoluutioon päästään vain, jos valolähteen emissiospektristä suodatetaan pitkät aallonpituuskomponentit pois. Kaikissa valotuksissa käytettiin 465nm ylittävät aallonpituuskomponentit poistavaa suodinta, jolloin jäljelle jäi efektiivisesti 334 ja 313 nm emissiopeikkit. Toisaalta maskien boorilasisubstraatin absorptiokerroin kasvaa jyrkästi 350 nm alapuolella, ja resistille saakka saatiin käytännössä vain tehokkaasti vaimentunut 334 nm komponentti. Maskin läpäisykertoimeksi saatiin UV-mittarin avulla noin 19%. Ongelmien ilmettyä prosessin eteneminen luonnollisesti hidastui, mikä altisti näytteet välillä pitkiksi ajoiksi huoneilmaan. Esille tuli myös puutteellisuuksia käytetyissä pinnan puhdistusmenetelmissä; märkäetsaus tuotti epätasaisia pintoja. Näytteiden ASA-114-116 prosessointi keskeytettiin näytteiden rikkouduttua lopullisesti ohmisen metalloinnin lämpökäsittelyvaiheessa. Prosessoinneissa mukana olleiden, aiemmin suoritetuista MBE-testikasvatuksista peräisin olleiden näytteiden osalta prosessointi saatiin viedyksi päätökseen, mikä oli saavutus sinänsä.

Ensimmäisen prosessointierän sähköiset mittaukset

Tasajännitemittaukset suoritettiin parametrianalysointilaitteella (liite 1). Metalloinneissa paljastuneen vuon suuntausongelman takia ensimmäisen prosessoinnin saanto jäi olemattomaksi. Metallin keräytyminen resistin reunoihin oli tuottanut katkoksia mesaportaiden ylityskohdissa ja metallikerrosten risteysalueilla. Hilat olivat tyypillisesti oikosulussa lähteen tai nielun kanssa. Prosessoiduista näytteistä löydettiin vain yksi rakenne, josta oli mitattavissa jonkinlaisia transistoriominaisuuksia (näyte ASA-21, vahvistinrakenne A21, tuloasteen transistori). Mitattu transistoriominaiskäyrä on esitetty liitteessä 7. Rakenteen transkonduktanssi g_m , joka on nieluvirran muutoksen suhde hilajännitteen muutokseen, oli noin 60 mS/mm, mikä jää viidesosaan heteroliitost transistorilta odotetusta arvosta. Suurilla virroilla virran kyllästymiseen tarvittava jännite V_{DS} oli suuri. Mitattu rakenne edusti siis lähinnä huonolaatuista MESFET-tyyppistä transistoria, jonka sarjavastukset olivat suuria. Koska prosessointi oli kokonaisuutena ottaen mennyt heikosti, ei huono transkonduktanssiarvo kuitenkaan vielä mietityttänyt.



Kuva 20: MODFET-prosessin kronologinen kehitys



Toinen erä:

Seuraavaa prosessointikertaa varten liftoff-tekniikkaa hiottiin paremmaksi ja suunniteltiin metallointikammion näytteenpitimeen kallistuselin vuon suuntaamiseksi kohtisuoraan pintaa vastaan. Mesaetsauksen yhteydessä suoritettiin joitakin kokeita reaktiivisen ionietsauksen (RIE) käytöstä siinä toivossa, että etsausjälki olisi tasaisempi. Haluttiin päästä myös loivempaan mesaportaaseen, jolloin metallointi portaan yli ei enää olisi ollut yhtä suuntakriittinen. Etsauksessa ei kuitenkaan päästy toivottuun tulokseen ja palattiin märkäetsaukseen.

Siirryttäessä prosessoinnissa toiseen maskivaiheeseen havaittiin, ettei maskinkohdistus onnistunut: näyte-erä oli kiero. Epitaksisessa kasvatuksessa oli poikkeuksellisesti käytetty takaa kiillotettuja kiekkoja, jotka eivät olleet lämmönjohtavuuden suhteen yhteensopivia muiden kasvatusparametrien kanssa. Kiekonpitimen aiheuttamat jännitykset olivat tuottaneet kasvatuksen aikana kiekkoon paljaalla silmällä näkyviä kidetason muutoksia. Maskia kohdistettaessa näytteen ja maskin väliin jäävä n. 30µm suuruinen ilmarako ei enää riittänyt, vaan näytteet lähinnä sotkivat maskia kohdistuksen aikana. Vaikka jännityksillä ja dislokaatioilla tiedettiin olevan vaikutusta mm. MESFET-transistorien kynnysjännitteeseen [35], prosessointia päätettiin jatkaa vielä tiedostamattomien prosessitekniisten ongelmien kartoittamiseksi. Näytteet neliöitiin siten, että kierouden vaikutus minimoitui, minkä jälkeen

kohdistus alkoi onnistua.

Yksikerros-liftoff -tekniikalla saavutettu profiili oli vain välttävästi kuvan 17 mukaisesti räystäämäinen. Pienikin suuntausepätkkuus metalloitaessa riitti kuvan 19 mukaiseen lopputulokseen. Lisäksi hilakuvioinnin yhteydessä todettiin, että hilamaskin valmistus ei ollut onnistunut parhaalla mahdollisella tavalla. 0,5 mikrometrin hilan saavuttaminen maskinvalmistajan normaaliprosessilla osoittautui otaksuttua vaikeammaksi, ja lopulta tyydyttiin hieman epämääräiseen 1,1 mikrometrin maskiin. Resistin kehityksen aikana kuviot leviävät tavallisesti vielä hieman lisää, joten kuvan 21 mukainen kohdistusvara hilan molemmiin puolin oli kutistunut lähes olemattomiin. Nielun tai lähteen oikosulku hilan kanssa oli vältettävissä vain täydellisesti onnistuneella maskien kohdistamisella.

Toisen prosessointierän sähköiset mittaukset

Komponenttien välinen eristys tarkastettiin kytkemällä jännite kahden substraattikontaktin välille ja mittaamalla virran suuruus. Eristyksen hyvyyden tunnuslukuna pidettiin näin saatua substraattivastusta. Vertailun vuoksi mittaukset tehtiin aina samoista kontaktipareista, joiksi valittiin transistorien A9 ja A10 substraattikontaktit (liite 4). Vastuksen jakautumisesta kontaktin ylimenovastuksen ja substraatin kesken saatiin tuntuma vertaamalla vierekkäisistä kontakteista saatua tunnuslukua sirusta toiseen mitattuun arvoon. Kontaktien välimatkat olivat tällöin 400 μ m ja 5600 μ m. ASA-165:lle mitattiin A9-A10-vastukseksi 300-500 Ω . Sirusta toiseen vastus oli vain hieman suurempi, joten kontaktiresistanssi dominoi. ASA-169:lle vastaavat luvut olivat 1.9k Ω ja 2.7k Ω . Liitteessä 8 on esitetty näytteistä ASA-165 ja ASA-169 mitattujen transistorien ominaiskäyrät. Substraatin vuotovirta näkyy käyrissä transkonduktanssin surkastumisena, kun merkittävä osa virrasta kiersi aktiivisen kanava-alueen. 'Kyllästymisalueella' virran kulmakerroin on iso. Suurten sarjavastusten takia virran saturaantumista tapahtuu vasta, kun $V_{DS} > 2V$ (ASA-169). Joitakin transistoreja mitailtaessa havaittiin, että kynnysjännite oli siirtynyt positiiviseen suuntaan simuloituun arvoon verrattuna.

Komponenttien välillä virta kulki yksinomaan 'seostamattomassa' GaAs-bufferissa. Johtavuus saattoi johtua jostain n-tyypin saasteesta, esim. rikistä, joka taas voisi olla peräisin rikkijäämistä MBE:n kuumissa osissa tai kasvatusta edeltäneestä rikkihappokäsittelystä. Koska aiemmin vastaavaa ongelmaa ei ollut, se käsiteltiin satunnaisena virheenä kasvatuksessa, joka todettiin epäonnistuneeksi jo näytteiden kierouden ilmettyä.

Kontaktivastukset ja niiden hajonta osoittautuivat luvattoman suuriksi. Tarkempia mittauksia lukuarvojen laskemiseksi ei kuitenkaan voitu suorittaa vuotovirtojen takia. Käytetty kontaktointimenetelmä poikkesi kirjallisuudessa hyviä tuloksia antaneesta [26] vain n^+ GaAs pintakerroksen ja n^+ AlGaAs:n väliin sijoitetun 10 molekyylikerrosta paksun AlAs-kerroksen osalta. Kerroksen tehtävänä oli pysäyttää hilaresessointi tarkasti AlGaAs:n rajapintaan, jolloin kynnysjännitteen vaihtelu jää pieneksi. AlAs:n ei pitänyt vaikuttaa kontaktin muodostumiseen, vaikka ehdotonta varmuutta asiasta ei ollut.

Eräs mahdollinen selitys suurille sarjaresistansseille on kanavan sulkeutuminen enemmän tai

vähemmän kontaktimetallin ja hilan välisellä alueella. Ideaalitapauksessa tällä alueella on n^+ GaAs-kerroksen suojaama heteroliitos, jonka pintatiheys n_s on maksimissa. Maksimipintatiheyden olisi täytynyt jostain syystä jäädä huomattavasti alle kasvatetuille heteroliitosrakenteille suunnitellun arvon, tyypillisesti $10^{11}..10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Kynnysjännitteiden siirtyminen positiiviseen suuntaan saattoi olla oire samasta asiasta. Prosessointi sisälsi kuitenkin vielä tässä vaiheessa niin monta epävarmuustekijää, ettei yksiselitteistä tulkintaa esiintyneille epäkohdille voitu antaa. Prosessointikerran hyödyksi kirjattiin viivytyksiä aiheuttaneiden kohtien kartoittaminen ja ratkaisu, minkä ansiosta prosessin rutiininomaisuus kasvoi. Tulkittavissa olevien sähköisten mittausten tekemiseksi tarvittiin uusi prosessointikierros, jossa näytteet olisivat suoria, mesaetsaus ja muut kemialliset käsittelyt ennustettavampia pinnan kontaminoitumisen estämiseksi ja metallointi kunnossa.

Kolmas erä

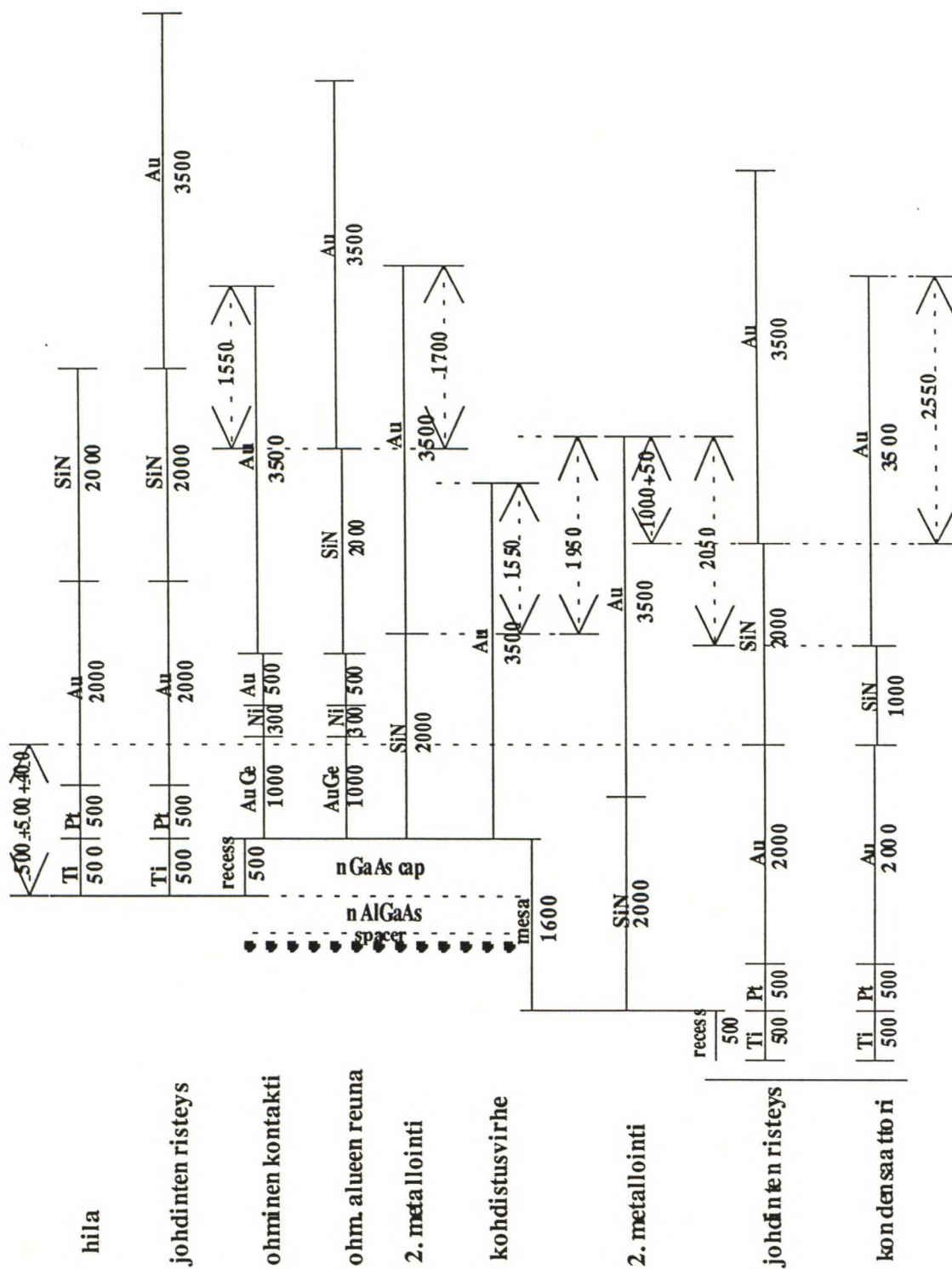
Näytteiden kerrosrakenteet on esitetty kuvassa 22 ja kerrosrakenteiden perusteella simuloidut [21] ominaisuudet liitteessä 5. Pintatiheysiksi n_s ja kynnysjännitteiksi V_T odotettiin ASA-202:lle $n_s=1,1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ja $V_T=-0.648\text{V}$, ASA-205:lle $n_s=9 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ja $V_T=-0.488\text{V}$ ja ASA-206:lle $n_s=7 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ja $V_T=-0.214\text{V}$. Prosessoitavien kerrosten paksuuksista seuraa kuvan 23 mukainen topografia. Paksuuksien toleranssit on kirjattu liitteeseen 6. Nähdään, että metallointien suhteen kriittisin kohta on 2. metalloinnin ja hilametalloinnin risteys mesojen ulkopuolella. Toisaalta vaikeimmin hallittava suure on mesaetsauksen syvyys. Kuvan 23 ja liitteen 6 perusteella prosessoinnin läpivieminen vaatii etsauksen kontrolloimista vähintään

=====	500Å n GaAs cap	$2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	
=====	5ML AlAs stopper		
=====	300Å n $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$	$2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	
=====	30Å $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ spacer		ASA-202
.....	1µm S.I. GaAs epi		
	20x10ML AlAs/GaAs superhila		
	substraatti		
=====	500Å n GaAs cap	$1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	
=====	5ML AlAs stopper		
=====	400Å n $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$	$1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	
=====	30Å $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ spacer		ASA-205
.....	1µm S.I. GaAs epi		
	20x10ML AlAs/GaAs superhila		
	substraatti		
=====	500Å n GaAs cap	$5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$	
=====	5ML AlAs stopper		
=====	500Å n $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$	$5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$	
=====	30Å $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ spacer		ASA-206
.....	1µm S.I. GaAs epi		
	20x10ML AlAs/GaAs superhila		
	substraatti		

200Å toleranssilla. Tästä syystä märkäetsausprosessi hiottiin kappaleen 4.1.2 mukaiseksi ennen prosessoinnin aloittamista.

Prosessointi sujui tällä kertaa ongelmitta. Ainoastaan hilametallointi epäonnistui, kun näytteenpidin jäi kääntämättä upokasta kohti viimeistä metallikerrosta höyrystettäessä, mistä seurasi kuvan 19 mukainen lopputulos. Ohmista metallointia valmisteltaessa epäluulo kontaktin lejeerautumiskyvystä AlAs-kerroksen läpi oli kasvanut jo niin suureksi että n^+ GaAs- ja AlAs-kerrokset etsattiin pois kontaktimetalloinnin alta ennen höyrystystä täysin tietoisina AlGaAs:iin tehdyn kontaktin huonommista ominaisuuksista. Kokonaisprosessin läpivieminen kesti tällä kertaa enää noin kuukauden.

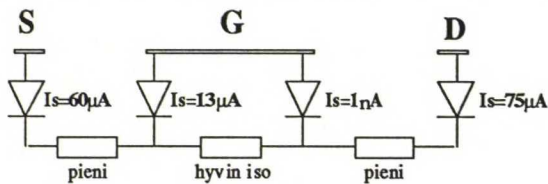
Kuva 22: Näytteiden kerrosrakenne



Kuva 23: Prosessin topografiakuva

Kolmannen erän sähköiset mittaukset

Substraatin johtavuus ei enää ollut ongelma. Mitatut substraattivastukset olivat $M\Omega$ -luokkaa, mistä voitiin todeta, että bufferin seostustiheys oli saatu niin alhaiseksi, ettei ohmista kontaktoitumista substraattiin ollut välttämättä edes tapahtunut. Aktiivisten komponenttien kontaktoitumisessa havaittiin usein oireilua: virrat olivat ensin nA-luokkaa kunnes tapahtui läpilyönti, minkä jälkeen jäljelle jäi tyypillisesti pieniä lineaarisia vastuksia. Tyypillisessä ominaiskäyrämittauksessa nieluvirta pysyi V_{DS} -pyyhkäisyn aikana pienenä 1-1.5 volttiin saakka. Sitten virta ryöstäytyi parametrianalysoijan virtarajoituksen määräämään arvoon hyppäksenomaisesti. 'Läpilyönnin' jälkeen lähteen ja nielun väli edusti muutamien kymmenien ohmien vastusta, jossa ei havaittu virran saturoitumista eikä hilaohjauksella ollut mitään vaikutusta. Ilmiön selitys on todennäköisesti muualla kuin probeneulojen huonossa kontaktoitumisessa piiriin. Näytteistä saatiin mitatuksi lähinnä hilaelektrodien muodostamien Shottky-diodien ominaiskäyriä, joista näkyi edelleen suuri sarjavastus. Suurin osa transistoreista oli oikosulussa hilametalloinnissa sattuneen unohduksen ansiosta. Joissakin



Kuva 24: FATFET:n 'sijaiskytkentä'

tapauksissa oli nähtävissä, että ohminen kontaktointi oli jäänyt tasasuuntaavaksi. Oli todettava, että todennäköisesti ohminen kontaktointi ei ollut onnistunut suoraan AlGaAs:iin. Esimerkiksi ASA-206:n transistori E1 (FATFET, $W=90\mu m$, $L=70\mu m$, liite 4) käyttäytyi mittausten perusteella kuvan

24 esittämän DC-sijaiskytkennän mukaisesti. FATFET:t osoittautuivat ainoiksi transistoreiksi, joissa kanava-alueen vastus oli merkittävä osa kokonaisvastuksesta drainilta sourcelle, jolloin virran saturoituminen saatiin mittauksissa esille. Tosin virrat jäivät mikroampeeritasolle, mikä viittasi siihen, ettei kunnollista elektronien keskittymistä liitokseen ollut tapahtunut. Eräänä selityksenä esitettiin, että MBE-AlGaAs -kerroksen vapaiden elektronien konsentraatio oli jäänyt huomattavasti alle seostustiheyden, jolloin heteroliitoksen maksimi elektronikonsentraatio jäi pieneksi. Myöhemmin suoritettavat testikasvatukset ja HALL-mittaukset tukivat oletusta.

Kontaktoitumista 10 ML AlAs:n läpi tutkittiin vielä lyhyellä testillä: Kuvan 25a mukaisesti kasvatettu näyte kuvioitiin $50 \times 50 \mu m$ ruudulliseksi ja paloitetiin neljään osaan. Yhdestä palasta poistettiin resistiaukkojen kohdilta kolme n^+ GaAs-kerrosta, toisesta kaksi ja kolmannelta yksi. Ohmisen metalloinnin ja lämpökäsittelyn jälkeen saatiin kuvan 25b mukaiset testipalat. Suoritettiin vertailumittaus nelipistemenetelmällä (kuva 25c) ja vierekkäisten kontaktien väliseksi vastukseksi saatiin

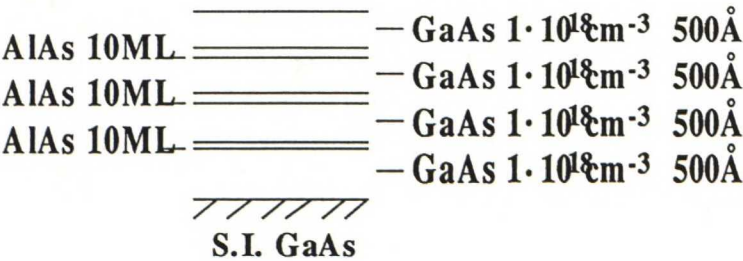
$$R_0=27\Omega$$

$$R_1=28\Omega$$

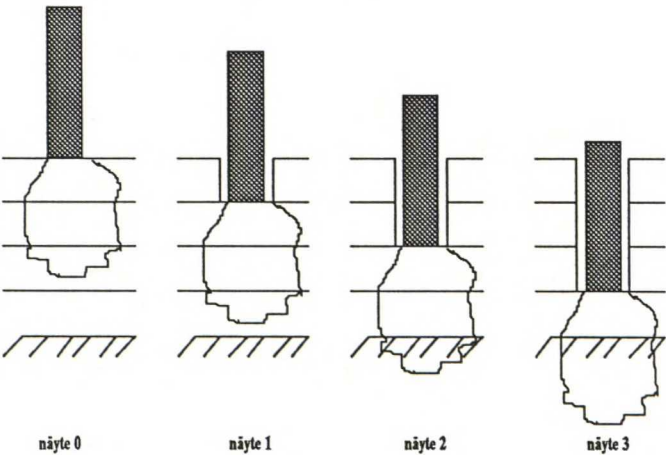
$$R_2=40\Omega$$

$R_3 = \text{hyvin iso, n. } 60\text{M}\Omega$

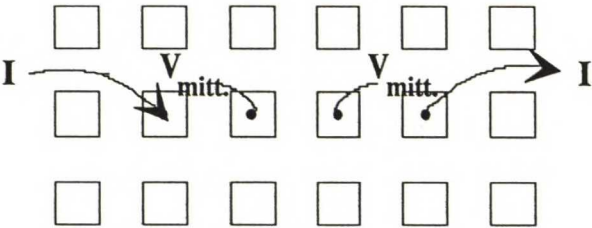
Tulos viittaa siihen, että kontaktoituminen tapahtuisi kahden AlAs-kerroksen läpi n. 1000-1500Å syvyydelle, ja ehjä AlAs-kerros estäisi virran kulun kerrosten välillä pystysuorassa suunnassa. Vaikka AuGe-lejeerinki sulaa lämpökäsittelyssä, ei kontaktoitumista pystysuorissa suunnissa todennäköisesti tapahtunut, sillä metalloinnin ja lämpökäsittelyn välillä oli riittävän pitkä aika natiivioksidin muodostumiselle kuopan pystysuorien reunojen ja metallin väliin. Suuri resistanssi viimeisessä tapauksessa viittaa siihen, että hyvä kontakti muodostuisi vasta ensimmäisen 500Å syvyisen kerroksen jälkeen. Kolmannella prosessointikerralla kontaktit tehtiin vain 300-500Å paksuun AlGaAs:iin. Ohmisen kontaktin muodostava NiAs(Ge)/GaAs-raerajarintama saattoi joutua syvälle seostamattomaan GaAs:iin, eikä kontaktoitumista elektronikaasuun välttämättä päässyt tapahtumaan edes tapauksissa, joissa elektronikaasu oli olemassa.



Kuva 25 a: Kerrosrakenne



Kuva 25 b: Testikontaktit



Kuva 25 c: Nelipistemittaus

Kuva 25: AlAs-testi

5. Johtopäätökset

MODFET:n valmistuksessa keskeiseksi ongelmaksi nousi lineaarisen, pieniohmisen ja toistettavan kontaktin tekeminen elektronikaasun ja johdinmetallin välille. Kontaktin muodostumisen fysiikka on perustuessaan rakeisiin luonteeltaan tilastotieteellinen, ja 10 molekyylikerrosta AlAs:ia riitti jakamaan mielipiteet kontaktin muodostumisesta. Tutkimusten edetessä heränneet epäilyt kaksidimensioisen elektronikaasun olemassaolosta eivät ainakaan helpottaneet kontaktoitumisprosessin selvittämistä. Onneksi koko AlAs-kerrosta ei käytännössä tarvita, sillä voidaan käyttää etsejä, joiden selektiivisyys on riittävä etsin pysähtymiseen $n^+GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ -rajalla. Jos kyseinen AlAs-kerros riittää estämään virran kulun n^+GaAs -pintakerroksesta AlGaAs:iin, kappaleen 3.1.3 mukainen kaksikerrosmalli romuttuu täysin. Koska pintakerroksen kautta kulkeva virtatie (kuva 12) on tukittu, kontaktiresistanssi kasvaa huomattavasti.

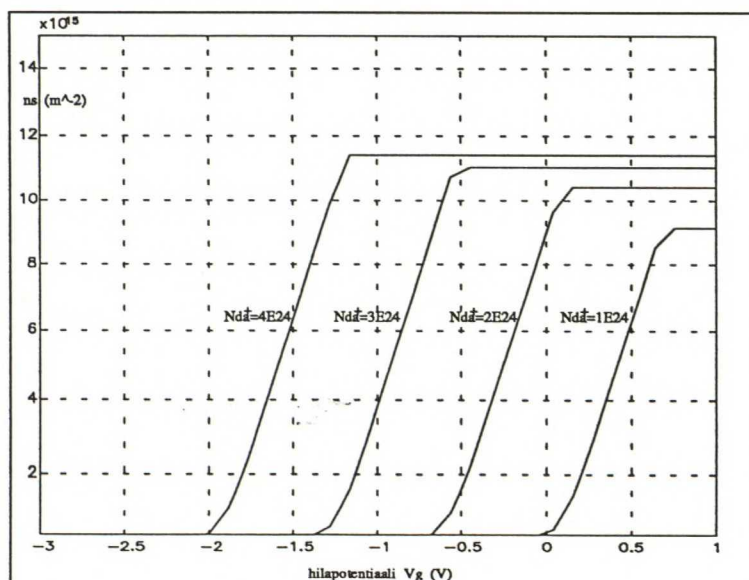
Ni/AuGe/Ni/Au -kontaktimetallonnille on hiljattain esitetty lupaava vaihtoehto [36]. Pd/AuGe/Ag/Au -rakenteella on saavutettu $2 \cdot 10^{-6} \Omega cm^2$ spesifinen kontaktiresistanssi GaAs:iin ja $2.1 \cdot 10^{-5} \Omega cm^2$ resistanssi $Al_{0,55}Ga_{0,45}As$:iin. Pienemmän kontaktiresistanssin lisäksi rakenne näyttää olevan vähemmän herkkä metallin ja GaAs:n väliin jääville natiivioksidoille. Kontakti tunkeutuu GaAs:iin vain n. 400-500Å ja on kaiken lisäksi suhteellisen tasainen, mikä johtaa pieneen resistanssin keskihajontaan. Menetelmän pitäisi siis soveltua hyvin kaksikerrosmallin mukaisten matalien kontaktien tekemiseen.

MBE:llä saatava AlGaAs-materiaali on tunnetusti melko heikkolaatuista verrattuna GaAs:iin. Prosessista saatuja transistoreja mittailtaessa havaittiin kynnysjännitteissä järjestelmällistä siirtymistä positiiviseen suuntaan simuloituun arvoon verrattuna. Usein kynnysjännite oli niin paljon positiivisella puolella, että hila-lähde -diodin myötäsuuntainen virta kasvoi merkittäväksi ennen kuin kanava ehti aueta. Kaavoista (61) ja (64a) nähdään, että kanavan avaamiseen tarvittava hilapotentiaali V_{off} kasvaa, kun AlGaAs:n ionisoituneiden donorien konsentraatio N_{DA}^+ pienenee. Samaan suuntaan vaikuttaa myös johtavuusvyön epäjatkuvuuden ΔE_c pienentyminen. Kun kasvatettavien näytteiden kerrosrakenteita optimoitiin simulointiohjelmalla [21], käytettiin ΔE_c :lle likimääräiskaavaa $\Delta E_c = 1,1x \text{ eV}$, kun kappaleessa 2.1.3 saatiin kaava $\Delta E_c = 0,703x \text{ eV}$, missä x on AlAs-mooliosuus. Yhtälön (64a) perusteella korjaus johtaa suoraan kynnysjännitteen kasvuun 0,12V:lla, kun $x=0,3$.

Kun piiseostettua AlGaAs:a valaistetaan, kiteen varauksenkuljettajatiheys kasvaa. Matalissa lämpötiloissa valolla aikaansaatua johtavuuden kasvu säilyy usein pitkiä aikoja valaistuksen päätyttyä. Ilmiö liitetään [19] piiseostuksen aiheuttamiin loukkutiloihin, ja se on voimakkaimmillaan AlAs-mooliosuudella $x=0,32$. Seostuksella indusoitu vapaiden elektronien lukumäärä kasvatetussa AlGaAs:ssa saattoi jäädä näiden loukkutilojen vuoksi huomattavasti alle asetetun seostustiheyden. Halutun vapaiden elektronien konsentraation saavuttamisen merkitys näkyy kuvasta (25), jossa yhtälöiden (33) ja (64a) tasapainotuksen kautta saatu elektronikaasun maksimi pintatiheys on piirretty hilapotentiaalin funktiona, pitäen

ionisoituneiden donorien N_{DA}^+ konsentraatiota varioitavana parametrina. Tasapainotuksessa alivöiden energiat E_i määrättiin yhtälöstä (41). AlAs-mooliosuus x oli 0,3, seostetun AlGaAs:n paksuus 300Å ja seostamattoman välikerroksen paksuus 30Å. Muut laskennassa käytetyt vakiot löytyvät liitteen 9 MATLAB-tiedostosta. Parametrin arvolla $N_{DA}^+ = 2 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$ saatu käyrä vastaa näytettä ASA-202, jos kaikki donoriatomit oletetaan ionisoituneiksi. Prosessoitujen transistorien kanavan avaamiseen olisi kuitenkin tarvittu suurempi positiivinen hilajännite kuin hilan myötäsuuntaisen Shottky-diodin kynnysjännite salli. Hilavirta kasvoi merkittäväksi ennen kuin kanavavirta ehti saada käyttökelpoisia arvoja transistoritoiminnan havaitsemiseksi. Kuvan 25 mukaisesti ASA-202:n tapauksessa riitti, että elektronitiheys jäi puoleen suunnitellusta.

Kun myöhemmin MBE:llä kasvatettujen $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ -testinäytteiden elektronitiheyksiä tutkittiin alustavasti Hall-mittauksin, todettiin, että Hall-elektronikonsentraatiot kyllästyivät $2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ paikkeille. Eräs selitys onkin, että suurilla seostuskonsentraatioilla (suurilla piikennon lämpötiloilla) piiatomien todennäköisyys ryhmittyä arseenisijoihin kidehilassa kasvoi [19], jolloin saatiin akseptoreja donorien sijasta. MODFET-transistorien valmistamiseksi on ensiarvoisen tärkeää saada loukkutilojen lukumäärä minimoitua ja selvittää jäljelle jäävistä tiloista aiheutuvan korjauksen suuruus suunnitteluparametreihin ennustettavan kynnysjännitteen saavuttamiseksi. Maksimi elektronikonsentraation tahallinen tai tahaton pienentäminen kasvattaa myös ohmisen kontaktin ja hilan välillä olevan alueen resistiivisyyttä, mikä johtaa suurempiin sarjaresistansseihin muilta osin onnistuneesta kontaktista huolimatta. Tarvittaessa on siirryttävä käyttämään pienempiä AlAs-mooliosuuksia, vaikka samalla heteroliitoksen johtavuusvyön epäjatkuvuus pieneneekin, jolloin elektronien keskittyminen kanavaan on vähäisempää. Kerrosten kasvunopeuden pienentämisen jälkeen haluttu seostustiheys voidaan saavuttaa matalammalla piikennon lämpötilalla, millä myös voi olla merkitystä loukkutiloista eroon pyrittäessä.



Kuva 25: Elektronikaasun pintakonsentraatio n_s hilapotentiaalin V_g funktiona, parametrina ionisoituneiden donorien konsentraatio N_{DA}^+ .

6. Yhteenveto

Tässä diplomityössä tarkastelin galliumarsenidin (GaAs) ja piillä seostetun alumiinigallium-arsenidin (n^+ AlGaAs) väliseen heteroliitokseen perustuvan kenttävaikutustransistorin valmistusta. Teoreettisessa osuudessa esittelin ensin GaAs- ja AlGaAs-materiaalien ja niiden välisen heteroliitoksen tärkeimpiä ominaisuuksia. Heteroliitoksen johtavuusvyön epäjatkuvuuden määräytyminen ja piillä seostetun AlGaAs:n donoritilojen aktivointienergia saivat osakseen erityistä huomiota. Heteroliitosta kuvaavien yhtälöiden johtamisen jälkeen tarkastelin liitoksen soveltamista kenttävaikutustransistoriin. Johdin ensin ideaalisen heteroliitostransistorin tasavirtaominaisuuksia kuvaavat yhtälöt, ja lisäsin sitten mukaan sarjaresistanssien vaikutuksen. Johdantona valmistustekniseen osuuteen käsittelin vielä elektronikaasun kontaktointia ja sarjavastuksen mallintamista kaksikerrosmallilla.

Koska tämä diplomityö oli laboratorion ensimmäinen vakava yritys heteroliitoskenttävaikutustransistorin valmistamiseksi, valitsin valmistustekniseen osuuteen kronologisen käsittelytavan painottaen niitä kohtia, joiden suorittamisessa ilmeni käytännön hankaluuksia. Rajoitteiden kartoittamista pidän itse tämän diplomityön tärkeimpänä antina; yhden sattumalta onnistuneen heteroliitostransistorin valmistamisesta ei olisi hyötynyt kukaan.

Prosessointeja suoritettiin kolme. Rakenteiden sähköisten ominaisuuksien perusteella voitiin esittää, ettei haluttua elektronien kertymistä heteroliitokseen vielä saavutettu käyttökelpoisilla hilajännitteillä. Syyksi todettiin piillä seostetun AlGaAs:n loukkutilat, ja esitettiin jatkotoimenpiteet häiriön poistamiseksi. Kasvatettujen näytteiden prosessoinnin osalta otettiin merkittäviä askeleita eteenpäin, kuten kappaleessa 4.1.2 esitetyn oksidikerrosten ohennusmenetelmän käyttöönotto pinnan puhdistuksessa ja menetelmän ansiosta saavutettu suuri tarkkuus märkäetsauksessa. Heteroliitostekniikan asettamat vaatimukset sallittaville toleransseille niin epitaksisessa kasvatuksessa kuin muussakin prosessoinnissa tarkentuivat, ja luotiin realistinen perusta myös muiden heteroliitokseen perustuvien funktionaalisten rakenteiden prosessoimiseksi jatkossa.

7. Lähdeviiteluettelo

- [1] Bardeen J., Brattain W. H.: *The transistor, a semi-conductor triode*, Phys. Rev., vol. 74, 1948, June 25, pp. 230-31
- [2] Kirkpatrick C. G., Chen R.T., et al.: *Growth of bulk GaAs*, In: Howes M. J., Morgan D. V. (ed): *Gallium arsenide materials, devices, and circuits*, New York, 1985, John Wiley & Sons, pp. 39-94
- [3] Karp S., Roosild S.: *Darpa, SDI, and GaAs*, In: Milutinovic V.M., Fura D. A. (ed): *Gallium Arsenide computer design*, Washington D.C., 1988, IEEE, pp. 85-87
- [4] Esaki L., Tsu R.: *Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors*, IBM J. Res. Develop., January 1970, pp. 61-65
- [5] Cho A. Y., Casey H. C.: *GaAs-Al_xGa_{1-x}As double-heterostructure lasers prepared by molecular-beam epitaxy*, Appl. Phys. Lett., vol. 25, 1974, no. 5, pp. 288-90
- [6] Dingle R., Stormer H., Gossard A.C., Wiegmann W.: *Electron mobilities in modulation doped semiconductor heterojunction superlattices*, Appl. Phys. Lett., vol. 31, 1978, pp. 665-67
- [7] Mimura T., et. al.: *A new field-effect transistor with selectively doped GaAs/n-Al_xGa_{1-x}As heterojunctions*, Jpn. J. Appl. Phys., vol. 52, 1980, pp. L225-L227
- [8] Ascroft N. W., Mermin N. D.: *Solid State Physics*, Philadelphia, 1976, HRW International Editions, 826 p.
- [9] Sze S. M. : *Physics of Semiconductor Devices*, 2nd ed., New York, 1981, John Wiley & Sons, 868 p.
- [10] Adachi S.: *GaAs, AlAs, and Al_xGa_{1-x}As: Material parameters for use in research and device applications*, J. Appl. Phys., vol 58, 1985, no. 3, pp. R1-R29
- [11] Anderson R. L.: *Experiments on Ge-GaAs heterojunctions*, Solid State Electron., vol. 5., 1962, pp. 341-51
- [12] Dingle R., Wiegmann W., Henry C. H.: *Quantum states of confined carriers in very thin Al_xGa_{1-x}As-GaAs-Al_xGa_{1-x}As heterostructures*, Phys. Rev. Lett., vol. 33, 1974, no. 14, pp. 827-30
- [13] Kroemer H., Chien W., Harris J. S. Jr, Edwall D.D.: *Measurement of isotype heterojunction barriers by C-V profiling*, Appl. Phys. Lett., vol. 36, 1980, no. 4, pp. 295-97
- [14] Bauer R. S., Zurcher P., Sang H. W. Jr.: *Inequality of semiconductor*

- heterojunction conduction-band-edge discontinuity and electron affinity difference*, Appl. Phys. Lett., vol 43, 1983, no. 7, pp. 663-665
- [15] Adams M. J., Nussbaum A.: *A proposal for a new approach to heterojunction theory*, Solid State Electron., vol. 22, 1979, pp. 783-91
- [16] Ross O.: *Theory of extrinsic and intrinsic heterojunctions in thermal equilibrium*, Solid State Electron., vol. 23, 1980, pp. 1069-75
- [17] Pearton S. J., Shah N. J.: *Heterostructure Field Effect Transistors*, In: Sze S. M. (ed.): *High Speed Semiconductor Devices*, New York, 1990, John Wiley & Sons, pp. 283-334
- [18] Hill A. J., Ladbroke P. H.: *Dependence of conduction-band discontinuity on aluminium mole fraction in GaAs/AlGaAs heterojunctions*, Electron. Lett., vol.22, 1986, no. 4, pp. 218-20
- [19] Chand N., Henderson T, Klem J., Masselink W. T., Fischer R.: *Comprehensive analysis of Si-doped $Al_xGa_{1-x}As$ ($x=0$ to 1): Theory and experiments*, Phys. Rev. B., vol. 30, 1984, no. 8, pp. 4481-92
- [20] Lee K., Shur M.: *Electron density of the two-dimensional electron gas in modulation doped layers*, J. Appl. Phys., vol 54, 1983, no 4, pp. 2093-2096
- [21] Taskinen K.: *Jänniteohjatun heteroliitoksen mallintaminen*, Espoo, 1992, Teknillinen Korkeakoulu/El. Fys. laboratorio, Diplomityö 138, 57 s.
- [22] Vinter B.: *Subbands and charge control in a two-dimensional electron gas field-effect transistor*, Appl. Phys. Lett., vol 44, 1984, no. 3, pp. 307-09
- [23] Drummond T. J., Masselink W. T., Morkoc H.: *Modulation-doped GaAs/(Al,Ga)As heterojunction field-effect transistors:MODFETs*, IEEE Proc., vol. 74, 1986, no. 6, pp. 773-822
- [24] Delagebeaudeuf D., Linh N. T.: *Metal-(n) AlGaAs-GaAs two-dimensional electron gas FET*, IEEE Trans. Electr. Dev., vol. 29, 1982, no. 6, pp. 955-60
- [25] Feuer M. D.: *Two-layer model for source resistance in selectively doped heterojunction transistors*, IEEE Trans. Electr. Dev., vol. 32, 1985, no. 1, pp. 7-11
- [26] Murakami M., et al.: *Microstructure studies of AuNiGe ohmic contacts to n-type GaAs*, J. Vac. Sci. Technol., vol. 4, 1986, no.4, pp. 903-11
- [27] Kuan T.S., Batson P.E., et al.: *Electron microscope studies of an alloyed Au/Ni/Au-Ge ohmic contact to GaAs*, J. Appl. Phys., vol 54, 1983, no.12, pp. 6952-57

- [28] Goronkin H, et. al.: *Ohmic contact penetration and encroachment in GaAs/AlGaAs and GaAs FET's*, IEEE Trans. Electr. Dev., vol. 36, 1989, no. 2, pp. 281-87
- [29] Pruniaux B. R., Adams A. C.: *Dependence of barrier height of metal semiconductor (Au-GaAs) on thickness of semiconductor surface layers*, J. Appl. Phys., vol 43, 1972, pp. 1980-03
- [30] Mukherjee S. D., Woodard D. W.: *Etching and Surface Preparation of GaAs for Device Fabrication*, In: Howes M. J., Morgan D. V. (ed): *Gallium arsenide materials, devices, and circuits*, New York, 1985, John Wiley & Sons, pp. 119-60
- [31] Garner C. M., Su C. Y., et al.: *Effect of GaAs or $Ga_xAl_{1-x}As$ oxide composition on Schottky- barrier behavior*, J. Appl. Phys., vol 50, 1979, no. 5, pp. 3376-82
- [32] Elliot D. J.: *Integrated circuit fabrication technology*, 2nd ed., New York, 1989, McGraw-Hill, 540 s.
- [33] Dunbobbin D.R., Faguet J.: *Single-step, positive-tone, lift-off process using AZ 5214-E resist*, SPIE Optical/Laser Microlithography, vol. 922, 1988 pp. 247-54
- [34] Sirén E.: *Galliumarsenidi MESFETin valmistaminen ja ominaisuuksien tutkiminen*, Espoo, 1990, Teknillinen Korkeakoulu/El. Fys. laboratorio, Diplomityö 132, 102 s.
- [35] Miyazawa S, Ishii Y.: *Dislocations as the origin of threshold voltage scatterings for GaAs MESFET on LEC-grown semi-insulating GaAs substrate*, IEEE Trans. Electron dev., vol. 31, 1984, no. 8, pp. 1057-62
- [36] Zheng L. R., et. al.: *Shallow ohmic contacts to n-type GaAs and $Al_xGa_{1-x}As$* , Appl. Phys. Lett., vol. 60, 1992, no. 7, pp. 877-79

8. Liitteet

- Liite 1: Prosessointilaitteet
- Liite 2: Prosessiaskleet
- Liite 3: Testirakenteet
- Liite 4: MODFET-maski
- Liite 5: Kolmannen erän näytteiden simulointitulokset
- Liite 6: Kerrospaksuuksien toleranssit
- Liite 7: Mitatun transistorin ominaiskäyrä
- Liite 8: Substraattivirtojen vaikutus transistorin ominaiskäyriin
- Liite 9: Yhtälön (48) tasapainotukseen liittyvät MATLAB-tiedostot

Liite 1

Prosessointilaitteet:

Vaihe:	Laite:	Valmistaja:
Heteroliitosrakenteiden kasvatus	MBE	VG
Kuivaetsaukset	RIE-asema	Electrotech
Paksuuksien mittaus	profilometri SLOAN DEKTAK II	Veeco
Nitridointi	PECVD-asema	Plasmatech
Nitridin etsaus	KPE-asema	Plasmatech
Valotus	Süss MJB 3+UV300 optiikka	Karl Süss
Lämpökäsittelyt	Heatpulse 210	Heatpulse
Elektronimikroskopia	JEOL 25S III	JEOL
Sähköiset mittaukset	HP 4142B Modular DC- Source/Monitor+	
	HP 9153 + IMA-software	Hewlett-Packard

Liite 2

Prosessiaskelet:

1. S.I. GaAs- substraatti
2. pesu (MBE- kasvatusta varten)
3. MBE- kasvatus
4. pesu tri, ace, met, DI H₂O 5 min UÄ, DI H₂O huuhtelu 2min
5. M1LF (mesakuviointi, tavallinen)
6. Oksidinpoisto+mesaetsaus (syvyys = h2deg + 500 Å) sitrushappoetsi
7. M2DF (ohmisten kontaktien kuviointi, liftoff)
8. Oksidinpoisto juuri ennen metallointia
9. ohminen metallointi Ni / AuGe / Ni / Au 50 / 1000 / 300 / 500 Å
10. liftoff, asetoni
11. pesu ace, DI H₂O 5 min UÄ, DI H₂O huuhtelu 2 min
12. RTA- käsittely (465 C, 90 sek.)
13. pesu ace, DI H₂O 5 min UÄ, DI H₂O huuhtelu 2 min
14. M3DF (hilakuviointi, liftoff)
15. Oksidinpoisto+hilaresessointi (sitruunahappoetsi)
16. Oksidinpoistol juuri ennen metallointia
17. hilametallointi Ti / Pt / Au 500 / 500 / 2000 Å
18. liftoff, asetoni
19. pesu ace, DI H₂O 5 min UÄ, DI H₂O huuhtelu 2 min
20. Oksidinpoisto juuri ennen nitridointia
21. nitridointi PECVD 1000 Å (tai 2000 Å jos ohitetaan 21a. - 21f.)
- 21a. pesu ace, DI H₂O 5 min UÄ, DI H₂O huuhtelu 2 min
- 21b. M4DF (kondensaattorikuviointi, tavallinen)
- 21c. nitridin etsaus, KPE 1000 Å ja resistin poisto
- 21d. pesu ace, DI H₂O 5 min UÄ, DI H₂O huuhtelu 2 min
- 21e. Oksidinpoisto juuri ennen nitridointia
- 21f. nitridointi PECVD 1000 Å (kondensaattorieriste)
22. pesu ace, DI H₂O 5 min UÄ, DI H₂O huuhtelu 2 min
23. M5DF (kontaktiaukkojen kuviointi, tavallinen)
24. nitridin etsaus, KPE 2000 Å (kontaktiaukot)
25. pesu ace, DI H₂O 5 min UÄ, DI H₂O huuhtelu 2 min
26. M6DF (2. metalloinnin kuviointi, liftoff)
27. Oksidinpoisto juuri ennen metallointia
28. 2. metallointi Cr / Au 50 / 3500 Å
29. liftoff, asetoni
- 29a. pesu ace, DI H₂O 5 min UÄ, DI H₂O huuhtelu 2 min
- 29b. Oksidinpoisto juuri ennen nitridointia
- 29c. nitridointi PECVD 2000 Å (naarmutussuojaus / passivointi)
- 29d. M7DF (padien aukkojen kuviointi, tavallinen)
- 29e. nitridin etsaus, KPE 2000 Å (padien aukot)

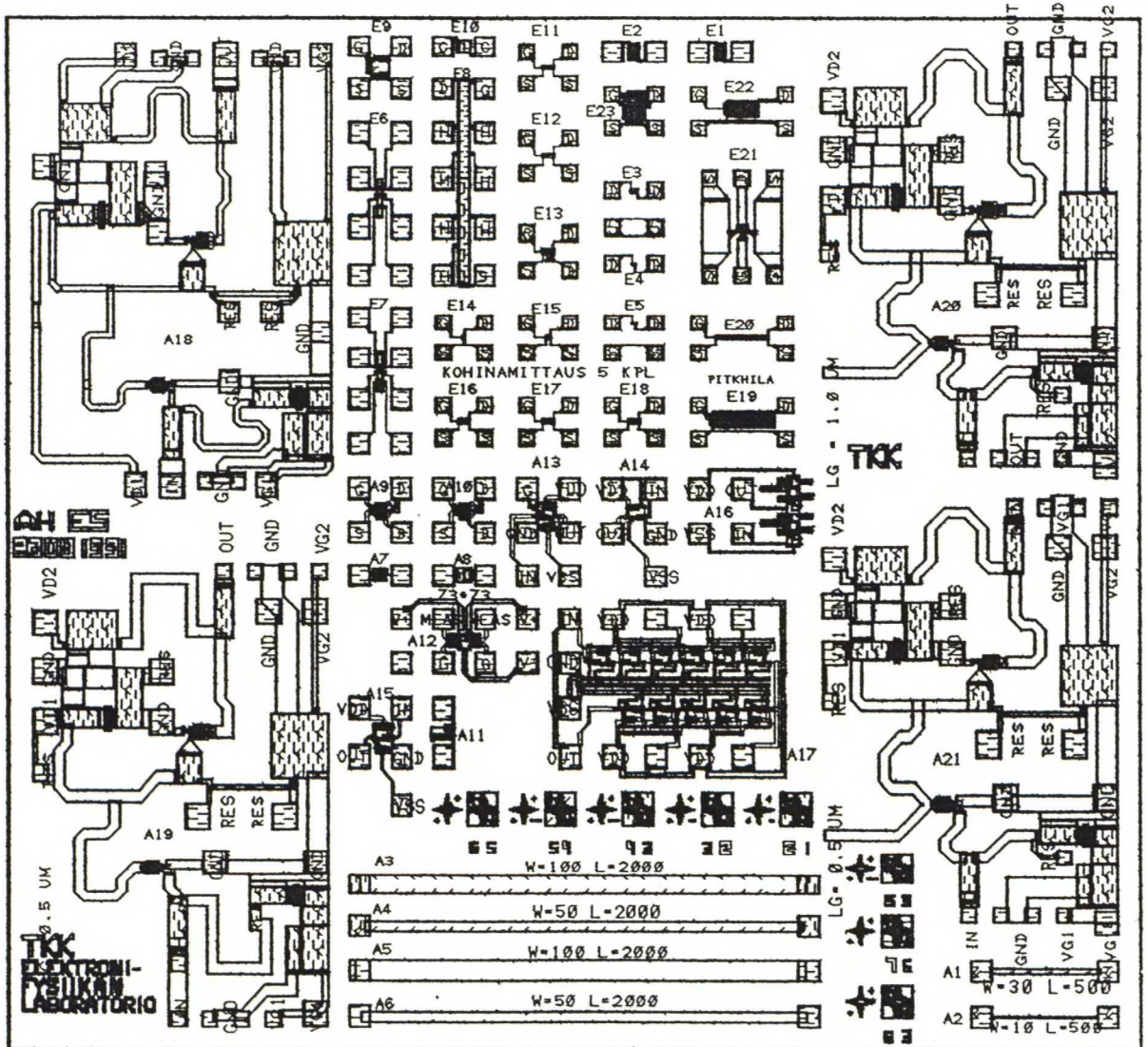
Liite 3

Testirakenteet:

W=rakenteen leveys, L=rakenteen pituus. Lukuarvot mikrometrejä.

Nimi:	Funktio:	Kuvaus:			
A1	johdin	hilametalli	W=30	L=500	
A2	johdin	hilametalli	W=10	L=500	
A3	johdin	hilametalli	W=100	L=2000	
A4	johdin	hilametalli	W=50	L=2000	
A5	johdin	2. metallointi	W=100	L=2000	
A6	johdin	2. metallointi	W=50	L=2000	
A7	spiraalikela				
A8	kondensaattori		73x73		
A9	transistori	0,5x200	4-hilainen	Lsd=3	backgate
A10	transistori	1,0x200	4-hilainen	Lsd=3	backgate
A11	testikytkentä: vakiovirtalähde				
A12	testikytkentä: virtapeili				
A13	invertteri	ulkoisesti jänniteohjattu kuorma			
A14	invertteri	resistanssikuorma			
A15	invertteri	transistorikuorma			
A16	operaatiovahvistin	12 transistoria			
A17	rengasoskillaattori	11-asteinen invertterialkiot A14			
A18	2-asteinen vahvsitin				
A19	2-asteinen vahvistin				
A20	2-asteinen vahvistin				
A21	2-asteinen vahvistin				
E1	kontaktiketju	10x2	väli 3		
E2	kontaktiketju	10x2	väli 2		
E3	diodi	20x20			
E4	diodi	5x5			
E5	diodi	10x10			

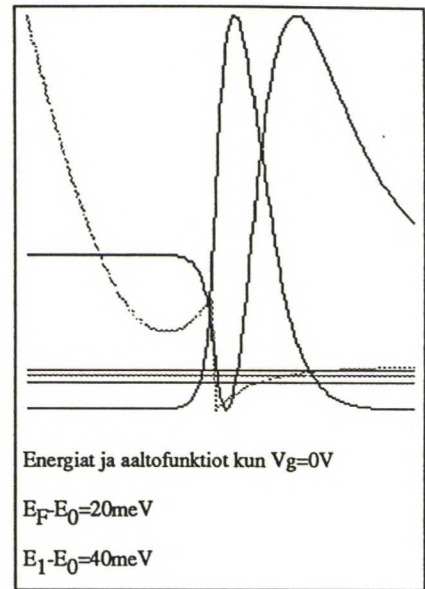
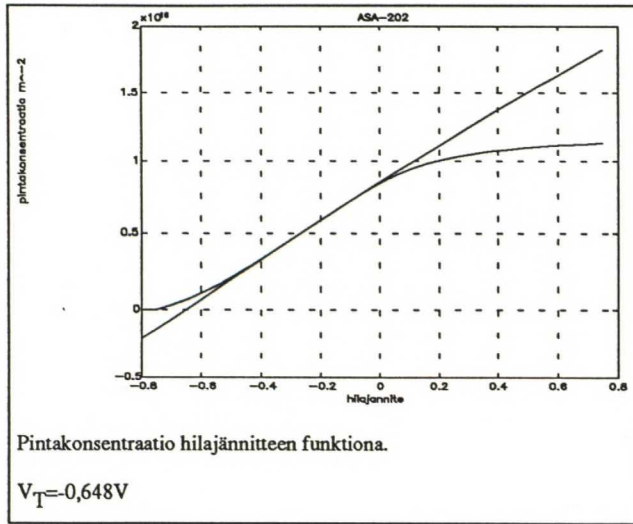
E6	TLM-rakenne			
E7	TLM-rakenne			
E8	HALL-testirakenne			
E9	FATFET	W=90	L=70	
E10	kondensaattori		60x60	
E11	transistori	0,5x60	Lsd=1,5	
E12	transistori	0,5x60	Lsd=2,0	
E13	transistori	1,0x60	Lsd=3,0	backgate
E14	transistori	1,5x15	Lsd=3,5	
E15	transistori	1,0x30	Lsd=3,0	
E16	transistori	2,0x60	Lsd=4,0	
E17	transistori	1,0x60	Lsd=3,0	
E18	transistori	0,5x60	Lsd=2,5	
E19	transistori	0,5x1250	5-hilainen	Lsd=2,5
E20	transistori	0,5x250	1-hilainen	Lsd=2,5
E21	transistori	0,5x50	T-malli	Lsd=2,5
E22	transistori	0,5x625	5-hilainen	Lsd=2,5
E23	transistori	0,5x650	10-hilainen	Lsd=2,5



MODFET- maski

Kolmannen erän näytteiden simulointitulokset:

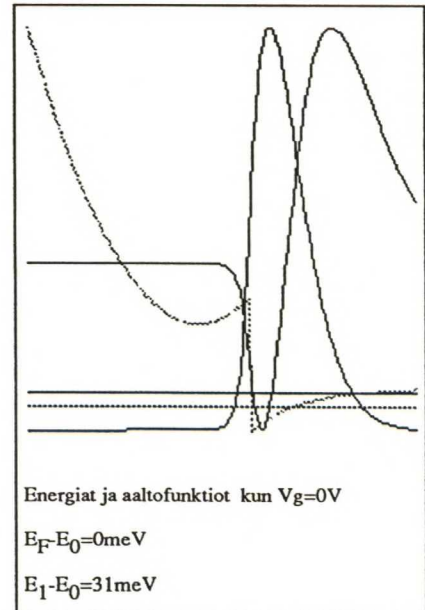
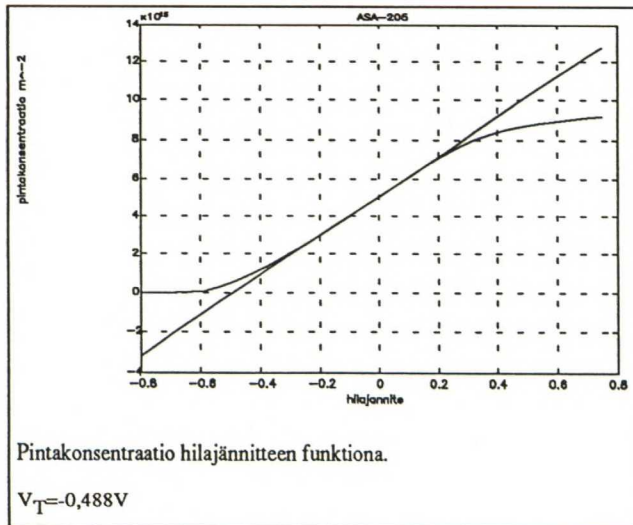
ASA-202:



Simulointiparametrit:

Lämpötila:	300K	AlGaAs:n n-seostus:	$2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
Ratkaisualue GaAs:ssa:	600Å	GaAs:n p-seostus:	$1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
n-AlGaAs: paksuus:	300Å	$E_F - E_C$ bulkissa:	-1.13 eV
Spacerin paksuus:	30Å		

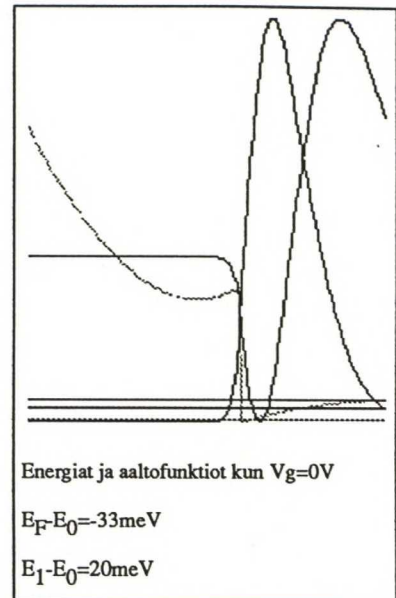
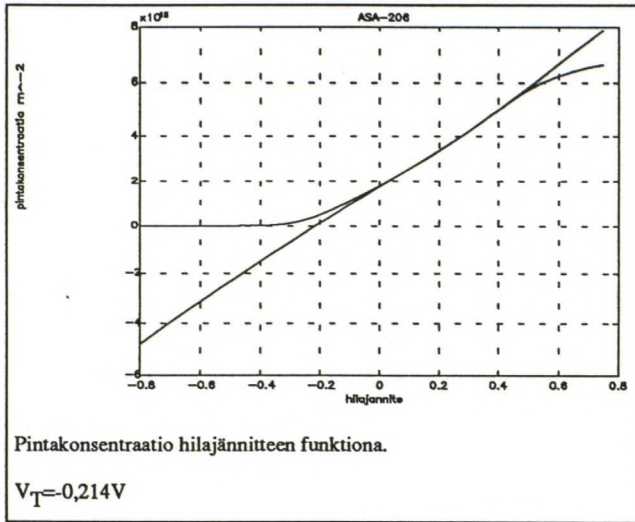
ASA-205:



Simulointiparametrit:

Lämpötila:	300K	AlGaAs:n n-seostus:	$1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
Ratkaisualue GaAs:ssa:	600Å	GaAs:n p-seostus:	$1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
n-AlGaAs: paksuus:	400Å	$E_F - E_C$ bulkissa:	-1.13 eV
Spacerin paksuus:	30Å		

ASA-206:



Simulointiparametrit:

Lämpötila:	300K	AlGaAs:n n-seostus:	$5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
Ratkaisualue GaAs:ssa:	600Å	GaAs:n p-seostus:	$1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
n-AlGaAs: paksuus:	500Å	$E_F - E_C$ bulkissa:	-1.13 eV
Spacerin paksuus:	30Å		

Liite 6

Kerrospaksuuksien toleranssit:

(Liittyy kuvaan 23)

-mesaporras:	hilamet.	+1400Å=46.7%
	2.met.	+1950Å=54.9%
-ohminen kontakti:	ulkoreunalla	+1700Å=47.9%
	sisäreunalla	+1550Å=43.7%

virhekohdistuksessa kun nitridiaukko ei osu ohmisen metallin

päälle	raon ulkor.	+1550Å=43.7%
	raon sisär.	+3550Å=100%

-risteystilanteet:

2.met./hilamet. mesan ulkopuolella	+1050Å=29.6%
kondensaattorirakenne	+2050Å=57.7%

-oikosulkeutuminen nitridin läpi:

2.met. ja hilamet. menevät päittäin +500Å. Nitridi kasvaa kuitenkin yhtä paljon pysty- kuin vaakapinnoille joten eristys säilyy.

Ei ongelmia aikaisemmissa prosessoinneissa.

-mesaetsaus:

Etsattava vähintään 500Å heteroliitosta syvemmälle

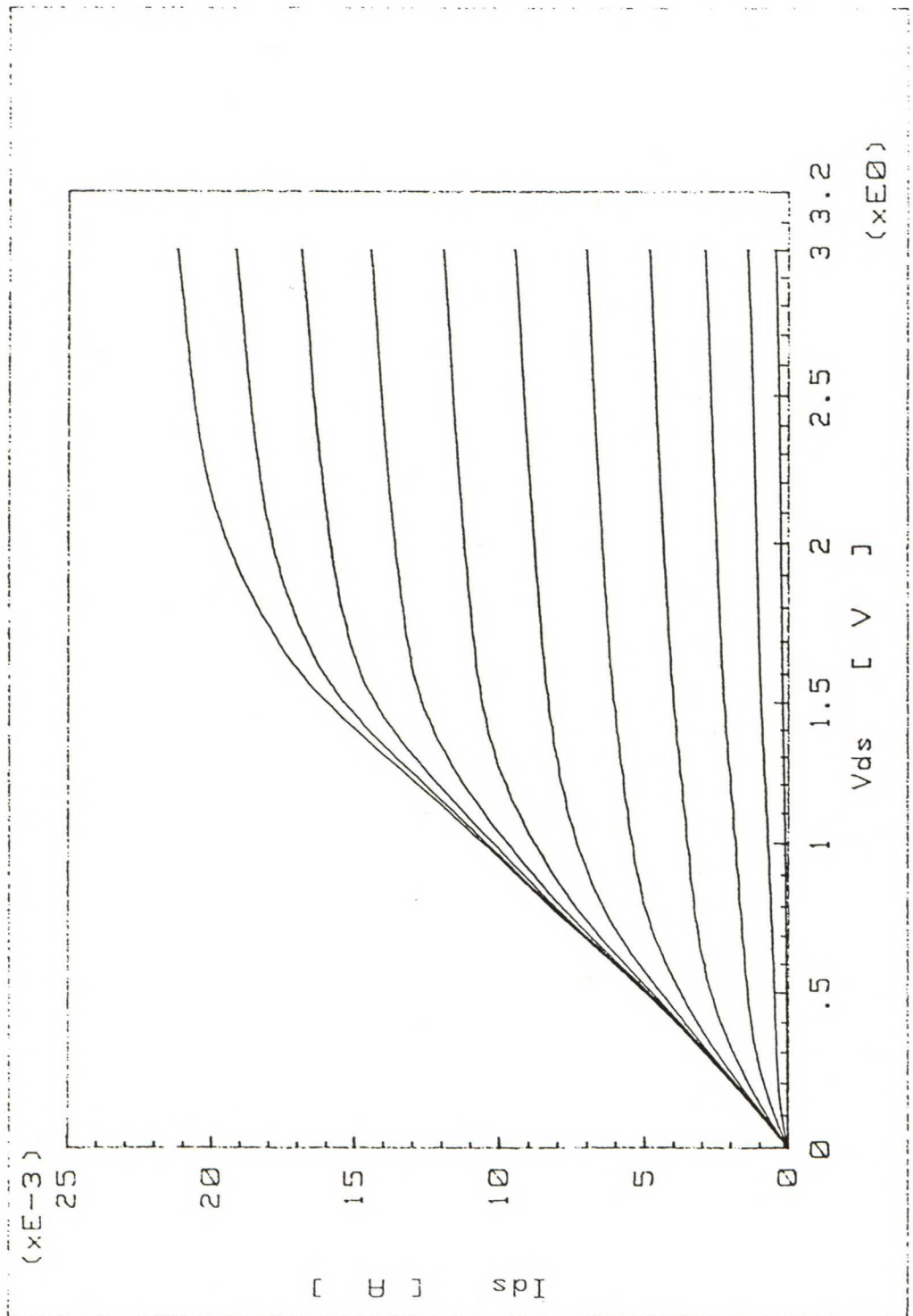
Ylietsaus: Ensimmäisenä rajoittaa hilametalli (400Å+500Å+500Å)

Variable1: Vds
 Single Linear
 Start 0.0000 V
 Stop 3.0000 V
 Step 30.0000mV
 Step NO. 101
 Compliance 25.0000mA

Variable2: /gs
 Start -1.80000 V
 Stop 200.000mV
 Step 200.000mV
 Step NO. 1
 Compliance 1.00000mA

Constants:
 Vbb 0.0000 V
 Compliance 10.0000mA
 Vgs 0.0000 V
 Compliance 25.0000mA

ASA-21

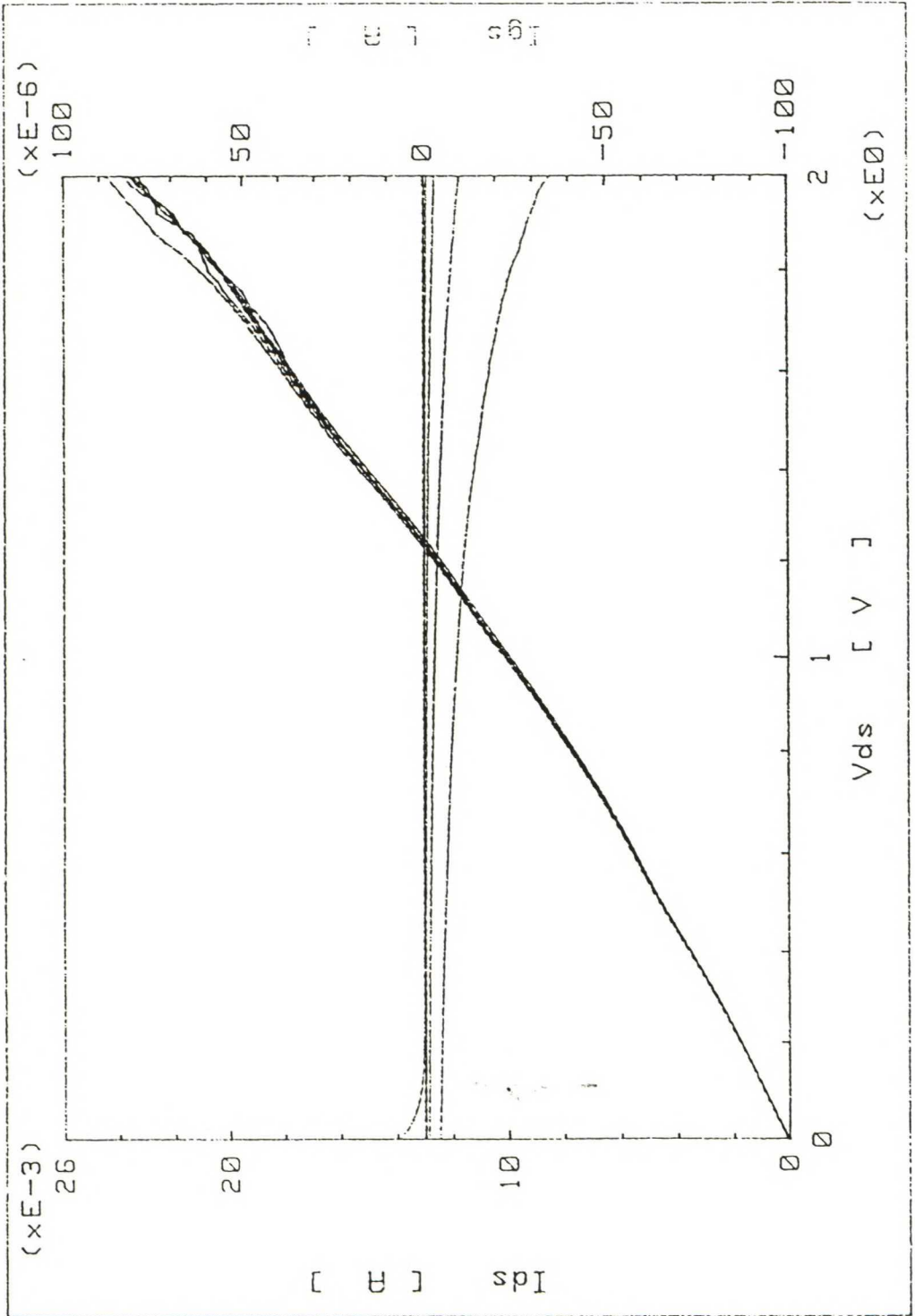


Variable1: Vds
 Single Linear
 Start 0.00000 V
 Stop 2.00000 V
 Step 20.2020mV
 Step NO. 100
 Compliance 200.0000mA

Variable2: Vgs
 Start -2.00000 V
 Stop 500.000mV
 Step 500.000mV
 Step NO. 6
 Compliance 1.00000mA

Constants:
 Vbb 0.00000 V
 Compliance 10.00000mA
 Vss 0.00000 V
 Compliance 200.0000mA

ASA 165



Yhtälön (48) tasapainotukseen liittyvät MATLAB-tiedostot:

Muuttujien oletusarvot ja näytön parametrien alustustiedosto alku.m:

```
x=0.3;
xyla=4e24;xala=1e22;
yyla=1.5e16;yala=1e14;
Ndsteppi=-xala;
vgyla=1.0;vgala=-3.0;
vgsteppi=-0.04;
vgskaala=[vgala,vgyla,yala,yyla];
Ndskaala=[xala,xyla,yala,yyla];
di=30e-10;
ddoped=300e-10;
Nd=1e24;
```

Vakioiden alustustiedosto wakiot.m:

```
%elektronin varaus q:
q=1.6021892e-19;
%tyhjän permittiivisyys e0:
e0=8.85419e-12;
%AlGaAs:n permittiivisyys; mooliosuus x:
ea=(13.1-3.*x).*e0;
%Shottkyvallin korkeus fiib:
fiib=1;
%AlGaAs:n yhteispaksuus da:
da=ddoped+di;
%Pinch-off-potentiaali Vp:
Vp=q.*Nd./(2.*ea).*(da-di).^2;
%elektronin lepomassa:
me=9.109534e-31;
%efektiivinen massa meff AlGaAs:ssa, AlAs-mooliosuus x:
meff=(0.067+0.083.*x).*me;
%reduoitu planckin vakio hb:
pi=3.141592653589793;
hb=6.626196e-34./(2.*pi);
%Boltzmannin vakio k:
k=1.380662e-23;
%lämpötila T:
T=300;
%elektronien tilatiheys alivyöllä D:
D=meff./(pi.*hb.^2);
%johtavuusvyön epäjatkuvuus dec:
dec=q.*0.7.*x;
%johtavuusvyön tilatiheys GaAs:ssa Nc:
Nc=4.7e23;
%johtavuusvyön tilatiheys AlGaAs:ssa Nca, AlAs-mooliosuus x:
Nca=((0.067+0.083.*x)./(0.067)).^1.5.*Nc;
%johtavuusvyön ja fermienergian ero bulk-AlGaAs:ssa dooa, 0 jos negatiivinen:
dooa=k.*T.*log(Nca./Nd);
dooa=(dooa>0)*dooa;
```


Maksimi pintatiheyden iterointi efns0.m:

%MATLAB-tiedosto elektronikaasun maksimipintakonsentraation
%ns laskemiseksi tasapainottamalla yhtälö (48)
%käyttää wakiot.m-tiedoston alustamia vakioita.

```
%annetaan pintatiheydelle lukuarvoja 'harvalla kammalla'
ns=[0:1e15:1e18];
%alivöiden energiat ene0 ja ene1:
ene0=q.*2.5e-12.*ns.^(2/3); ene1=1.28.*ene0;
%yhtälön (48) vasemmalta puolelta ratkaistu fermienergia ef(ns):
ef=dec-dooa-q.^2.*(ns.^2./(2.*ea.*Nd)+ns.*di./ea);
%yhtälön (48) oikealta puolelta laskettu pintatiheys ns2 saadulla ef:llä:
ns2=D.*k.*T.*(log(1+exp((ef-ene0)./(k.*T)))+log(1+exp((ef-ene1)./(k.*T))));

%funktioiden monotonisuuden perusteella voidaan valita uusi tarkastelualue...
raja=find(ns2<ns);
raja=raja(1);
%... ja uusi pintatiheyksien parvi 'tiheämmällä kammalla':
ns=[ns(raja-1):(ns(raja)-ns(raja-1))./1000:ns(raja)];
ene0=q.*2.5e-12.*ns.^(2/3); ene1=1.28.*ene0;
ef=dec-dooa-q.^2.*(ns.^2./(2.*ea.*Nd)+ns.*di./ea);
ns2=D.*k.*T.*(log(1+exp((ef-ene0)./(k.*T)))+log(1+exp((ef-ene1)./(k.*T))));

%funktioiden monotonisuuden perusteella voidaan valita uusi tarkastelualue...
raja=find(ns2<ns);
raja=raja(1);
%... ja uusi pintatiheyksien parvi 'tiheämmällä kammalla':
ns=[ns(raja-1):(ns(raja)-ns(raja-1))./1000:ns(raja)];
ene0=q.*2.5e-12.*ns.^(2/3); ene1=1.28.*ene0;
ef=dec-dooa-q.^2.*(ns.^2./(2.*ea.*Nd)+ns.*di./ea);
ns2=D.*k.*T.*(log(1+exp((ef-ene0)./(k.*T)))+log(1+exp((ef-ene1)./(k.*T))));

raja=find(ns2<ns);
raja=raja(1);
%tasapainotettu pintakonsentraatio nsefns0, vastaava fermienergia efefns0:
nsefns0=ns(raja);
efefns0=ef(raja);
ene0efns0=ene0(raja);
ene1efns0=ene1(raja);
```

Hilapotentiaalia Vg vastaavan pintakonsentraation iterointi efns.m:

```
%MATLAB-tiedosto hilaohjatun liitoksen pintakonsentraation
%määrittämiseksi tasapainottamalla yhtälöt (33) ja (64a).
%Laskentaperiaate sama kuin efns0.m-tiedostossa:
%käyttää wakiot.m-tiedoston muuttujia ja parametria Vg.

ns=[0:1e15:1e18];
ene0=q.*2.5e-12.*ns.^(2/3); ene1=1.28.*ene0;
ef=dec+q.*(Vg+Vp-fiib)-q.^2.*da.*ns./ea;
ns2=D.*k.*T.*(log(1+exp((ef-ene0)./(k.*T)))+log(1+exp((ef-ene1)./(k.*T))));

raja=find(ns2<ns);
raja=raja(1);
ns=[ns(raja-1):(ns(raja)-ns(raja-1))./1000:ns(raja)];
```

```

ene0=q.*2.5e-12.*ns.^(2/3); ene1=1.28.*ene0;
ef=dec+q.*(Vg+Vp-fiib)-q.^2.*da.*ns./ea;
ns2=D.*k.*T.*(log(1+exp((ef-ene0)./(k.*T)))+log(1+exp((ef-ene1)./(k.*T))));

```

```

raja=find(ns2<ns);
raja=raja(1);
ns=[ns(raja-1):(ns(raja)-ns(raja-1))./1000:ns(raja)];
ene0=q.*2.5e-12.*ns.^(2/3); ene1=1.28.*ene0;
ef=dec+q.*(Vg+Vp-fiib)-q.^2.*da.*ns./ea;
ns2=D.*k.*T.*(log(1+exp((ef-ene0)./(k.*T)))+log(1+exp((ef-ene1)./(k.*T))));

```

```

raja=find(ns2<ns);
raja=raja(1);
nsefns=ns(raja);
efefns=ef(raja);
ene0efns=ene0(raja);
ene1efns=ene1(raja);

```

Hilaohjauksen laskeminen nsvg.m:

```

wakiot;
efns0;
i=0;
for Vg=vgyla:vgsteppi:vgala,
i=i+1;
vgvektori(i)=Vg;
efns;
ehto=(nsefns>nsefns0);
pysty=ehto*nsefns0+(1-ehto)*nsefns;
vgpysty(i)=pysty;
end;
plot(vgvektori,pysty)

```